

97

**TRANSPORTE E ESPALHAMENTO EM UM LÍQUIDO DE FERMI:
PLASMA E MAGNETO-PLASMA EM SEMICONDUTORES**

Aurea R. Vasconcellos

ORIENTADOR

Prof. Dr. Roberto Luzzi

Tese apresentada ao Instituto de Física "Gleb Wataghin"
da Universidade Estadual de Campinas, como parte dos
requisitos para a obtenção do Grau de Doutor em Ciências

Agradecimento

**A Roberto Luzzi pela sua orientação constante e eficaz
no decorrer do presente trabalho.**

RESUMO

Neste trabalho, desenvolvemos um extensivo estudo de espalhamento inelástico de luz e de transporte em sistemas que, na literatura correspondente, são designados por plasmas de estado sólido, ou mais precisamente, no presente caso, plasmas em semicondutores. Estes sistemas representam um exemplo extremamente interessante de um líquido de Fermi. Nosso objetivo foi realizar este estudo em uma forma unificada, utilizando uma descrição em termos das quase-partículas de Landau. Consideramos o espalhamento inelástico da luz por este sistema. A secção de espalhamento é relacionada com a flutuação, induzida pelo potencial espalhador, no operador densidade de quase-partículas de Landau. Esta flutuação é obtida como solução de uma apropriada equação de transporte, deduzida usando o método do campo auto-consistente generalizado. A presença de um campo magnético uniforme e constante é considerada, e uma apropriada representação no espaço k é introduzida. A equação de transporte para a matriz densidade a uma quase-partícula de Landau, assim obtida, resulta corretamente invariante de calibre, e não está restrita ao limite de longos comprimentos de onda. O papel da interação de troca e de correlações coulombianas é discutido.

Usando o esquema descrito, foram feitas várias aplicações ao estudo do espalhamento inelástico da luz por plasma e magneto-plasma em semicondutores dopados tipo n :

i) No caso de espalhamento quase-elástico é mostrado que, em condições de quase-equilíbrio térmico, desvios do perfil maxwelliano do espectro Raman dos eletrons quentes, podem ser explicados por efeitos de troca e correlação coulombiana.

ii) Analisamos o espalhamento inelástico da luz, por excitações em magneto-plasma, para o caso de geometria experimental arbitrária. É estudado em detalhe o caso de um plasma não degenerado em semicondutores de banda parabólica. A mistura, do modo híbrido de plasma e primeiro modo ciclotrônico com o primeiro modo de Bernstein é discutida, assim como a sua dependência com a direção de propagação. São analisadas também, modificações da intensidade da linha Raman dependentes do campo magnético e devidas aos efeitos da interação eletrôn-eletrôn.

iii) Completando, estudamos o espalhamento inelástico da luz por processos com inversão na orientação do spin das quase-partículas individuais e por ondas de spin paramagnéticas em magneto-plasmas em semicondutores. Discutimos também a dependência do coeficiente de difusão de spin com o campo magnético e com a temperatura efetiva do sistema eletrônico.

I N D I C E

CAPÍTULO I : PROPÓSITOS E ALCANCE DESTE TRABALHO 1

CAPÍTULO II : EQUAÇÃO DE TRANSPORTE GENERALIZADA

1. Introdução	6
2. Equação de Movimento para a Matriz Densidade	7
3. Um Tratamento para a Equação de Movimento da Matriz Densidade	9
4. Método do Campo Auto-Consistente Generalizado	13
5. O Campo Magnético-Equação de Transporte Independente do Calibre	21
6. Efeitos de Blindagem e uma Forma Simplificada da Equação de Transporte	31
7. O Limite Clássico e a Equação de Boltzmann	32
8. Equação Fenomenológica de Silin	34
9. Equação de Transporte na Geometria Paralela com uma Forma Particular para o Potencial de troca	36
10. O Termo de Lorentz e o Potencial de Interação	37
11. Conclusões	38

CAPÍTULO III: A SECÇÃO DE ESPALHAMENTO

1. Introdução	40
---------------------	----

2.	Secção de Espalhamento	40
----	------------------------------	----

CAPÍTULO IV : ESPALHAMENTO DA LUZ POR PLASMA DE ESTADO SÓLIDO

1.	Introdução	47
2.	A Secção de Espalhamento	48
3.	Espalhamento por Flutuações na Densidade de Carga	49
3.a.	A Energia de Interação	49
3.b.	A Flutuação na Densidade de Carga	52
3.c.	Cálculo da Secção de Espalhamento	54
3.d.	O Gás Degenerado em $T = 0^{\circ}\text{K}$	57
3.e.	O Gás não Degenerado	60
4.	Espalhamento por Flutuações na Densidade de Spin	63
4.a.	A Energia de Interação	63
4.b.	A Flutuação na Densidade de Spin	65
4.c.	A Secção de Espalhamento	69
5.	Aplicação para o GaAs	70
6.	Conclusões	73

CAPÍTULO V : ESPALHAMENTO DE LUZ POR MAGNETO-PLASMA EM SÓLIDOS

1.	Introdução	77
2.	A Secção de Espalhamento	77
3.	Cálculo da Flutuação da Densidade de Car- ga em Campo Magnético	78
4.	Cálculo da Secção de Espalhamento	84

5.	Aplicação para um Semicondutor com Banda Parabólica	86
6.	A Geometria de Faraday ($\vec{q} \times \vec{B}_0 = 0$)	88
7.	A Geometria de Voigt ($\vec{q} \cdot \vec{B}_0 = 0$)	89
7.a.	A Função $L(\vec{q}, \omega)$ na Geometria Perpendicular	89
7.b.	O Gás Degenerado na Geometria Perpendicular	90
7.c.	O Gás não Degenerado na Geometria Perpendicular	94
8.	A Geometria Geral	95
8.a.	A Função $L(q, \omega)$ na Geometria Geral	95
8.b.	O Gás Degenerado	98
8.c.	O Gás não Degenerado	104
9.	Curvas de Dispersão para o GaAs	110
10.	Modificações na Intensidade das Linhas Dependentes do Campo Magnético	117
11.	Conclusões	119

CAPÍTULO VI : ESPALHAMENTO MAGNETO-RAMAN POR FLUTUAÇÕES NA DENSIDADE DE SPIN

1.	Introdução	121
2.	A Secção de Espalhamento	122
3.	A Flutuação na Densidade de Spin	122
4.	A Susceptibilidade de Spin	123
5.	O Coeficiente de Difusão de Spin	132
6.	O Espalhamento Raman por Ondas de Spin	

Paramagnéticas	136
7. Espalhamento por Excitações Individuais na Geometria Paralela	136
7.a. O Gás Degenerado	139
7.b. O Gás não Degenerado	141
Conclusões	146

CAPÍTULO VII : COMENTÁRIOS FINAIS	147
Apêndice A	150
Apêndice B	152
Apêndice C	154
Apêndice D	155

REFERÊNCIAS	157
Capítulo II	157
Capítulo III	162
Capítulo IV	163
Capítulo V	165
Capítulo VI	167
Apêndices	169

C A P Í T U L O I

INTRODUÇÃO GERAL : PROPÓSITOS E ALCANCE DESTES TRABALHOS.

Plasmas em semicondutores são sistemas físicos extremamente interessantes, devido a flexibilidade na escolha de materiais e condições, que permitem que parâmetros de relevância, tais como : frequência de plasma, frequência ciclotrônica, frequência dos fonons, energia de Fermi e energia de gap, possam ser comparáveis, assim como também permitem estudar situações com diferentes relações de dispersão para a energia, diferentes massas efetivas para os diferentes tipos de portadores, etc.

Situações de não-equilíbrio, tanto dos portadores quanto dos fonons ópticos com os quais possam interagir, podem também ser facilmente induzidas neste plasma por meio de várias técnicas. Além disso, como a concentração de portadores, n , pode ser controlada, seja por dopagem ou por crescente foto-excitação, aumentando-se a intensidade de bombeamento óptico, pode-se obter uma variação de n , tal que o parâmetro r_s (espaçamento entre portadores medido em unidades de raio de Bohr excitônico) varra a assim chamada "região metálica" ($1 \leq r_s \leq 5$), a qual é de particular interesse no estudo de efeitos de muitos corpos no gás de eletrons.

Espalhamento inelástico de luz é a técnica ideal para se estudar ondas de plasma (ou magneto-plasma) em semicondutores dopados. Nestes últimos anos este tipo de experiência tornou-se a ferramenta mais poderosa para se investigar a dinâmica

de plasma em semicondutores, graças ao desenvolvimento de lasers de alta potência e frequência adequada aos semicondutores de mais interesse (notadamente o laser de CO_2 ($\lambda_L = 10.6\mu$) e o Nd YAG ($\lambda_L = 1.06\mu$)).

O espectro Raman, então, é rico em informações sobre modos acoplados, efeito quânticos e distribuições não-equilibradas de excitações.

No Capítulo III, a secção de espalhamento Raman é relacionada com a flutuação, induzida pelo potencial espalhador, da matriz densidade a uma quase-partícula, ρ , sendo completado, a seguir, o desenvolvimento do formalismo a ser aplicado nos capítulos seguintes.

Usamos consistentemente um esquema baseado na teoria de Landau do líquido de Fermi. Este esquema proporciona, na nossa opinião, simplicidade e clareza no cálculo de muitas propriedades dos sistemas de fermions com interação. A flutuação de ρ , que determina o espectro Raman, é obtida como solução de uma equação de transporte generalizada que tem o potencial espalhador como potencial impulsionador.

Esta equação de transporte generalizada, para a matriz densidade de quase-partículas de Landau, é deduzida no Capítulo II. Preferimos a antecipação deste estudo, porque os resultados ora obtidos tem uma gama de aplicação muito mais ampla e geral do que aquela necessária aos estudos dos Capítulos IV a VI. Mais precisamente, o Capítulo II, individualmente, completa, dentro do esquema da teoria generalizada do campo auto-consistente, o estudo, em forma geral, da resposta dinâmica linear do líquido Fermi.

Consideramos o sistema de quase-partículas na presença de um campo magnético uniforme e constante e mostramos ser conveniente introduzir uma apropriada "representação matricial" no espaço \vec{k} , para melhor tratar tal situação.

A equação de transporte que obtemos para a matriz densidade a uma quase-partícula, resulta corretamente invariante por transformações de calibre e não está restringida ao limite de longos comprimentos de onda. Neste limite, a equação de transporte deduzida, torna-se a equação fenomenológica de Landau-Silin e no limite clássico, reproduz a equação de transporte de Boltzmann.

Analizamos a influência do potencial de troca ("exchange potential") sobre as flutuações induzidas no sistema e indicamos as condições nas quais o termo "à la Lorentz", envolvido com a flutuação do potencial auto-consistente pode ser negligenciado.

Estudamos a seguir, no Capítulo IV, o espalhamento da luz por um plasma em semicondutor, na ausência de campo magnético externo. São tratados dois mecanismos de espalhamento: por flutuações na densidade de carga e por flutuações na densidade de spin. É dada ênfase especial ao espalhamento quase-elástico por excitações individuais de um gás não degenerado, explicando-se os desvios experimentalmente observados do perfil gaussiano, a ser esperado no caso de uma distribuição maxwelliana de velocidades, como efeito da interação coulombiana.

Campos magnéticos adicionam novas dimensões a um já interessante problema, influenciando as propriedades do plasma em sólidos, essencialmente devido a quantização do movimento ele

trônico no plano normal ao campo magnético. Isto produz um conjunto discreto de níveis de energia, os níveis de Landau. Estudamos, no Capítulo V, o espalhamento Raman por excitações de magnetoplasma em semicondutores dopados, para uma geometria experimental arbitrária. Novamente enfatizamos o plasma não degenerado em um semicondutor de banda parabólica. Estudamos detalhadamente a dependência dos modos híbridos (plasma e primeiro modo ciclotrônico) com a geometria, assim como a mistura do modo híbrido superior com o primeiro modo de Bernstein. São discutidas modificações da intensidade Raman dependentes do campo magnético, observadas experimentalmente e não interpretadas anteriormente. Nossos cálculos sugerem que sejam devidas a efeitos de interação coulombiana.

Espalhamento por flutuações na densidade de spin também pode ocorrer em um magnetoplasma. Supondo que o mecanismo de acoplamento da radiação com o spin eletrônico seja via interação spin-órbita, estudamos o espectro da radiação espalhada no Capítulo VI.

O operador de colisão, da equação de transporte, negligenciado nos casos anteriores, é considerado agora. Isto leva ao aparecimento de um coeficiente de difusão de spin que influencia a largura de linha do espectro Raman. A dependência do coeficiente de difusão com o campo magnético e com a temperatura são tópicos abordados no capítulo. Finalizando, estudamos a possibilidade de excitações no contínuo de Stoner, no caso particular da geometria paralela. Estes tipos de estudos complementam aqueles dos capítulos anteriores, proporcionando informações sobre a

função de interação de duas quase-partículas de Landau no plasma em semicondutor.

As principais conclusões do trabalho, bem como perspectivas futuras, estão resumidas no Capítulo VII.

EQUAÇÃO DE TRANSPORTE GENERALIZADA

1. Introdução

A equação de transporte para um sistema de eletrons, interagindo entre si via potencial coulombiano, tem sido objeto de interesse e controvérsias nestes últimos anos (1,2). A equação de transporte de Boltzmann, na aproximação de elétron livre, tem sido largamente usada para calcular coeficientes de transporte em metais e semicondutores (3,4). Deduções mecânico quânticas da equação de Boltzmann tem aparecido na literatura (1,5,6,7). Dentro do esquema fenomenológico da teoria de Landau do líquido de Fermi (8,9), Silin propôs uma equação semi-clássica para estudar as oscilações de um fluido de eletrons degenerado (10) e predisse a existência de ondas de spin paramagnéticas observadas posteriormente por Schultz e Dunifer em metais alcalinos (11).

Apresentamos, neste capítulo, uma dedução de uma equação de transporte para o operador densidade a uma quase-partícula dentro de um tratamento de campo auto-consistente generalizado (12), válida para qualquer comprimento de onda da excitação, e através de uma representação apropriada para tratar o campo magnético, \vec{B}_0 , a equação deduzida é independente de calibre e com a vantagem adicional de se usar funções de onda de Bloch.

No caso limite de longos comprimentos de onda reobtemos a equação fenomenológica de Silin usada por Platzman e Wolff (13) para explicar os resultados da referência (11).

Resultados conflitantes apresentados em artigos recentes (1,2) concernentes ao caráter da velocidade envolvida no termo associado à contribuição da força de Lorentz, são também discutidos.

O método do campo auto-consistente generalizado aplica-se tanto para se estudar situações de equilíbrio, como de não equilíbrio (14-19) referentes à resposta linear a estímulos externos.

O método é conveniente para descrever o espalhamento de luz por plasmas em sólidos, pois a secção de espalhamento pode ser relacionada com a parte imaginária de um coeficiente de transporte (ou susceptibilidade generalizada) através do teorema de flutuação - dissipação. Este será o objetivo do Capítulo III.

2. Equação de Movimento para a Matriz Densidade

Consideremos um sistema de muitos corpos interagindo entre si. Designemos coletivamente por x os graus de liberdade nos quais estamos interessados, e por q todos os outros. A função de onda do sistema, ψ , será uma função de q e de x . Seja \hat{A} um operador relacionado apenas às variáveis x . Seu valor médio será dado por

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{q,x} \psi^*(q,x,t) \hat{A} \psi(q,x,t) . \quad (1)$$

Se definirmos o operador densidade $\hat{\rho}$ pela equação (20-23)

$$\langle x | \hat{\rho} | x' \rangle = \rho(x,x',t) = \sum_q \psi^*(q,x',t) \psi(q,x,t) , \quad (2)$$

o valor médio de \hat{A} poderá ser reescrito como

$$\langle \bar{A} \rangle = \sum_x [\bar{A} \rho(x, x', t)]_{x'=x} = S_p \{ \bar{\rho} \bar{A} \} \quad , \quad (3)$$

onde usamos a definição de traço de um operador.

Da equação (3) vemos que, no que se refere às variáveis x , o operador densidade $\bar{\rho}$, definido pela equação (2) descreve o sistema completamente. Podemos pensar nas variáveis q como descrevendo o banho no qual o sistema descrito pelas variáveis x , está imerso.

Vamos agora obter a equação de movimento para a matriz densidade. Seja \hat{H} a hamiltoniana do sistema isolado do banho e $\psi_n(xt)$ o conjunto ortonormal completo de auto-funções de \hat{H} . A matriz densidade pode ser expandida em termos destas funções como:

$$\rho(xx't) = \sum_{mn} A_{mn} \psi_m^*(x't) \psi_n(xt) \quad . \quad (4)$$

Derivando (4) em relação ao tempo, obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{i \partial \rho(xx't)}{\partial t} &= \sum_{mn} A_{mn} \psi_m^*(x't) \hat{H} \psi_n(xt) - \\ &\quad - \sum_{mn} A_{mn} \psi_m(xt) \hat{H}'^* \psi_m^*(x't) \quad , \quad (5) \end{aligned}$$

onde \hat{H}' é o mesmo operador \hat{H} , só que agindo agora sobre as variáveis x' . Além disso, para escrever (5) fizemos uso de $\hat{H} \psi_n = \epsilon_n \psi_n$ ($\epsilon_n = 1$ em todo o desenvolvimento).

Substituindo a equação (4) na equação (5) a equação de movimento para a matriz densidade será escrita como

$$i \frac{\partial \rho(xx't)}{\partial t} = (\hat{H} - \hat{H}'^*) \rho(xx't) \quad . \quad (6)$$

3. Um tratamento para a equação de movimento da matriz densidade

Na equação (6) a matriz densidade depende das N partículas do sistema, pois $x = (x_1, x_2, \dots, x_N)$. Na maioria dos problemas de interesse físico, os observáveis envolvem apenas partículas individuais ou pares de partículas. Vejamos as características especiais destes casos.

Se \hat{A} for um operador a uma partícula, isto é $\hat{A} = \sum_{i=1}^N \hat{A}_i$, o seu valor médio será dado por

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{A} \rangle &= \sum_{x_1 x_2 \dots x_N} \sum_{i=1}^N [A(x_i^1, x_i) \rho(x_1, x_2 \dots x_N, x_1^1 x_2^1 \dots x_N^1, t)] \quad \begin{matrix} x_1 = x_1^1 \\ \dots \\ x_N = x_N^1 \end{matrix} \\
 &= N \sum_{x_1} \left\{ A(x_1^1 x_1) \sum_{x_2 \dots x_N} [\rho(x_1 \dots x_N, x_1^1 \dots x_N^1; t)] \right\} \quad \begin{matrix} x_2 = x_2^1 \\ \dots \\ x_N = x_N^1 \end{matrix} \quad x_1 = x_1^1 \\
 &= N \sum_{x_1} \left\{ A(x_1^1 x_1) R^{(1)}(x_1 x_1^1; t) \right\} \quad x_1 = x_1^1 \\
 &= N S_{P(1)} \left\{ \hat{A} \hat{R}^{(1)} \right\} \quad (7)
 \end{aligned}$$

onde definimos o operador densidade a uma partícula $R^{(1)}$, pela equação

$$R^{(1)}(x_1 x_1^1; t) = \sum_{x_2 \dots x_N} \left\{ \rho(x_1 x_2 \dots x_N, x_1^1 x_2^1 \dots x_N^1; t) \right\} \quad \begin{matrix} x_2 = x_2^1 \\ \dots \\ x_N = x_N^1 \end{matrix} \quad (8)$$

A equação (7) nos mostra que para calcularmos valores médios de observáveis a uma partícula, só precisamos conhecer o operador densidade a uma partícula definido por (8).

O valor médio, de um operador \hat{B} , envolvendo duas partículas, isto é, $\hat{B} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \hat{B}_{ij}$ (a linha significa que só devemos considerar $i \neq j$), será dado por

$$\langle \hat{B} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{x_1 \dots x_N} \sum_{i,j=1}^N \left\{ B(x_i^i, x_j^j; x_i x_j) \rho(x_1 \dots x_N, x_1^i \dots x_N^i, t) \right\} \begin{matrix} x_1 = x_1^i \\ \vdots \\ x_N = x_N^i \end{matrix}$$

que pode ser reescrito como

$$\begin{aligned} \langle \hat{B} \rangle &= \frac{N(N-1)}{2} \sum_{x_1 x_2} \left\{ B(x_1^i x_2^i; x_1 x_2) R^{(12)}(x_1 x_2, x_1^i x_2^i; t) \right\} \begin{matrix} x_1^i = x_1 \\ x_2^i = x_2 \end{matrix} \\ &= \frac{N(N-1)}{2} S_{P_{12}} \left\{ \hat{B} \hat{R}^{(12)} \right\}, \end{aligned} \quad (9)$$

onde definimos o operador $R^{(12)}$ pela equação

$$R^{(12)}(x_1 x_2, x_1^i x_2^i; t) = \sum_{x_3 \dots x_N} [\rho(x_1 \dots x_N, x_1^i \dots x_N^i, t)] \begin{matrix} x_3 = x_3^i \\ \vdots \\ x_N = x_N^i \end{matrix} \quad (10)$$

As equações (7) e (9), são facilmente generalizáveis, para um operador \hat{O} envolvendo s partículas do sistema, de modo a obter

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{N(N-1) \dots (N-s+1)!}{s!} S_{P_{(12 \dots s)}} \left\{ \hat{O} R^{(12 \dots s)} \right\}, \quad (11)$$

sendo

$$R^{(12 \dots s)} = \sum_{x_{s+1} \dots x_N} [\rho(x_1 \dots x_N, x_1^i \dots x_N^i, t)] \begin{matrix} x_{s+1} = x_{s+1}^i \\ \vdots \\ x_N = x_N^i \end{matrix}. \quad (12)$$

Vamos agora procurar estabelecer as equações de movimento para $\hat{R}^{(1)}, \hat{R}^{(12)}, \dots, \hat{R}^{(12\dots s)}$, que não dependam explicitamente de ρ .

Sem perda alguma de generalidade, a hamiltoniana \mathcal{H} , do sistema de muitos corpos, pode ser escrita como

$$\mathcal{H} = \sum_i \hat{H}_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j}^N V_{ij}, \quad (13)$$

onde \hat{H}_i é a energia individual da i -ésima partícula, e V_{ij} a interação da i -ésima com a j -ésima partícula.

Substituindo a hamiltoniana, escrita na forma dada na equação (13), na equação de movimento do operador densidade (equação (6)), e calculando o traço sobre as variáveis $(x_2 \dots x_N)$ obtêm-se

$$\begin{aligned} i \frac{\partial R^{(1)}(x_1 x_1' t)}{\partial t} &= \sum_{x_2 \dots x_N} \sum_{i=1}^N [H(x_i t) - H^*(x_i' t)] \rho(x_1 \dots x_N, x_1' \dots x_N' t) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{x_2 \dots x_N} \sum_{i,j=1}^N [V(x_i x_j) - V^*(x_i' x_j')] \rho(x_1 \dots x_N, x_1' \dots x_N' t) . \end{aligned}$$

$x_2 = x_2'$
 \vdots
 $x_N = x_N'$

$x_2 = x_2'$
 \vdots
 $x_N = x_N'$

A primeira somatória tem todos os termos nulos, exceto aquele com $i = 1$ que resulta em

$$[H(x_1 t) - H^*(x_1' t)] R^{(1)}(x_1 x_1' t) .$$

Analogamente, a segunda somatória terá diferente de zero apenas $2(N-1)$ termos iguais a

$$[V(x_1 x_2) - V^*(x_1' x_2')] \sum_{x_3 \dots x_N} [\rho(x_1 \dots x_N, x_1' \dots x_N', t)] \quad \begin{matrix} x_3 = x_3' \\ \vdots \\ x_N = x_N' \end{matrix}$$

$$= [V(x_1 x_2) - V^*(x_1' x_2')] R^{(12)}(x_1 x_2, x_1' x_2'; t)$$

Então, a equação de movimento para o operador $\hat{R}^{(1)}$ será

$$i \frac{\partial R^{(1)}(x_1 x_1'; t)}{\partial t} = \{H(x_1, t) - H^*(x_1', t)\} R^{(1)}(x_1 x_1'; t) + \\ + (N-1) \sum_{x_2} \{[V(x_1 x_2) - V^*(x_1' x_2')] R^{(12)}(x_1 x_2, x_1' x_2'; t)\} \quad \begin{matrix} x_2 = x_2' \end{matrix} \quad (14)$$

Através de um procedimento semelhante pode-se estabelecer a equação de movimento para o operador $\hat{R}^{(12)}$, como

$$i \frac{\partial R^{(1,2)}(x_1 x_2, x_1' x_2'; t)}{\partial t} = [H_2(x_1, x_2, t) - H_2^*(x_1', x_2', t)] R^{(12)}(x_1 x_2, x_1' x_2'; t) + \\ + (N-2) \sum_{x_3} \{[V(x_1 x_3) + V(x_2 x_3) - V^*(x_1' x_3') - V^*(x_2' x_3')] R^{(123)}(x_1 x_2 x_3, x_1' x_2' x_3', t)\} \quad \begin{matrix} x_3 = x_3' \end{matrix}$$

onde introduzimos o operador

$$H_2(12) = (H(1) + H(2) + V(1,2))$$

A generalização óbvia destas equações, para o operador $R^{(12 \dots s)}$, será

$$i \frac{\partial R^{(12 \dots s)}}{\partial t} = (H_{1 \dots s} - H_{1 \dots s}^*) R^{(12 \dots s)} + \\ + (N-s) \sum_{x_{s+1}} \left\{ \sum_{r=1}^s (V(rs) - V^*(rs)) R^{(12 \dots, s+1)} \right\} \quad \begin{matrix} x_{s+1} = x_{s+1}' \end{matrix}$$

sendo

$$H_{1\dots s} = \sum_{i=1}^s H_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{s'} V_{ij}$$

Determinamos então, equações que nos permitem obter os operadores $\bar{R}^{(1)}, \bar{R}^{(12)}, \dots$, independentemente de ρ . Esta cadeia de equações acopladas é conhecida na literatura como a hierarquia BBGKY (25).

As manipulações apresentadas até agora são, de fato, apenas uma reformulação da equação de Schrödinger. Esta reformulação foi feita sem qualquer aproximação e; portanto as dificuldades inerentes ao sistema de muitos corpos continuam no nosso sistema de equações acopladas. Apresentaremos a seguir um tipo de desacoplamento.

4. Método do Campo Auto-Consistente Generalizado.

A equação de movimento para o operador densidade a uma partícula, $\bar{R}^{(1)}$, envolve todas as outras partículas do sistema através do operador $\bar{R}^{(12)}$.

Como tem sido constantemente realizado no tratamento de sistemas de muitas partículas com interação, a dependência exata da matriz densidade com o sistema inteiro deve ser substituída por alguma apropriada dependência funcional com a qual se tem esperança de um efeito simplificador na estrutura formal do problema, mas retendo-se as características de interesse (8,12).

De acordo com Bogoliubov e outros (26), a dependência temporal dos operadores densidades de ordens superiores à primeira, (isto é, envolvendo duas ou mais partículas) na cadeia BBGKY, deve ser governada pela dependência temporal de $R^{(1)}$, isto é, $R^{(1\dots s)}(x_1\dots x_s, x'_1\dots x'_s; t) = \bar{R}^{(1\dots s)}(x_1, \dots, x_s, x'_1, \dots, x'_s | R^{(1)}),$

podendo ser esperada uma equação cinética para $R^{(1)}$, da forma

$$\frac{\partial R^{(1)}}{\partial t} = L \{R^{(1)}\},$$

onde $L\{R^{(1)}\}$ representa alguma apropriada dependência funcional em $R^{(1)}$.

Eventualmente uma expressão do tipo

$$\frac{\partial R^{(1)}}{\partial t} = L_1 \{R^{(1)}\} + L_2 \{R^{(1)}R^{(1)}\} + \dots$$

onde L_1 e L_2 são operadores independentes do tempo, envolvendo uma, duas,... vezes o operador $R^{(1)}$, seria uma expansão formal da equação cinética. Argumentos semelhantes poderiam ser aplicados ao tratamento da energia do sistema obtendo-se expansões das do tipo do método auto-consistente generalizado como descrito por M. H. Cohen (12).

Tendo em mente estas idéias propomos reescrever o último termo do segundo membro da equação (14), via a identidade

$$\begin{aligned} \sum_{x_2} \left[[V(x_1 x_2) - V^*(x'_1 x'_2)] R^{(12)}(x_1 x_2 x'_1 x'_2; t) \right]_{x'_2 = x_2} &= \\ &= \sum_{x_2} \left[\langle x'_1 x'_2 | \phi | x_2 x_1 \rangle R^{(1)}(x_2 x'_2; t) R^{(1)}(x_1 x'_1; t) - \right. \\ &- \left. \langle x'_1 x'_2 | \psi | x_1 x_2 \rangle R^{(1)}(x_1 x'_2; t) R^{(1)}(x_2 x'_1; t) \right]_{x'_2 = x_2} + \\ &+ C(x_1 x'_1; t), \end{aligned} \quad (15)$$

onde

$$\begin{aligned}
 C(x_1 x'_1; t) &= \sum_{x_2} \left\{ [V(x_1 x_2) - V^*(x'_1 x'_2)] R^{(12)}(x_1 x_2 x'_1 x'_2; t) \right\}_{x'_2 = x_2} \\
 &- \sum_{x_2} \left\{ \langle x'_1 x'_2 | \phi | x_2 x_1 \rangle R^{(1)}(x_2 x'_2; t) R^{(1)}(x_1 x'_1; t) - \right. \\
 &- \left. \langle x'_1 x'_2 | \psi | x_1 x_2 \rangle R^{(1)}(x_1 x'_2; t) R^{(1)}(x_2 x'_1; t) \right\}_{x'_2 = x_2}
 \end{aligned}$$

A aproximação chave do método do campo auto-consistente generalizado consiste em desprezar o termo C , exceto pela redefinição (12,27) do potencial de interação $V(xx')$. Obtemos assim uma equação até segunda ordem em $R^{(1)}$.

Então, essencialmente, estamos substituindo o sistema de partículas interagindo por um sistema de quase-partículas de Landau, cuja interação depende do operador densidade a uma quase-partícula, que designaremos por $\rho^{(1)}$.

Ainda mais, dentro do esquema de Landau (8,12), a redefinição do potencial de interação, é feita com base na suposição da energia total do sistema, E , depender funcionalmente do operador densidade a uma quase-partícula. A hamiltoniana a uma quase-partícula, dada pela primeira derivada variacional da energia, é também dependente de $\rho^{(1)}$, como mostrará a equação (20), e a interação entre as quase-partículas será dada pela segunda derivada variacional da energia, tendo-se como definições das componentes direta e de troca

$$\langle y'_1 x'_1 | \phi | x'_1 y'_1 \rangle = \delta^2 E / \delta \rho^{(1)}(y'_1 y'_1) \delta \rho^{(1)}(x'_1 x'_1) ,$$

$$\langle y'_1 x'_1 | \psi | y'_1 x'_1 \rangle = \delta^2 E / \delta \rho^{(1)}(y'_1, x'_1) \delta \rho^{(1)}(y'_1, x'_1) ,$$

respectivamente.

No que segue, supomos que estas quantidades podem ser escritas em termos de potenciais a duas quase-partículas, na forma

$$\phi = V_c(x-y') \delta(x-x') \delta(y-y')$$

e

$$\psi = V_x(x-y') \delta(x-y) \delta(x'-y')$$

com $x \neq y'$ para levar em conta o fato da carga do gás de eletrons ser neutralizada pelo fundo positivo e uniforme.

A equação de movimento do operador $\hat{R}^{(1)}$, transforma-se dentro desta aproximação, em

$$\begin{aligned} i \frac{\partial \rho^{(1)}(xx't)}{\partial t} = & [H(x) - H^*(x')] \rho^{(1)}(xx't) \\ & + \sum_{x_1} \left\{ [V_c(xx_1) - V_c(x'_1x'_1)] \rho^{(1)}(x_1x'_1t) \right\}_{x'_1=x_1} \rho^{(1)}(xx't) \\ & - \sum_{x_1} \left\{ [V_x(xx_1) - V_x(x'_1x'_1)] \rho^{(1)}(xx'_1t) \rho^{(1)}(x_1x'_1t) \right\}_{x'_1=x_1} \end{aligned} \quad (17)$$

isto é, na equação de movimento para o operador densidade a uma quase-partícula.

As equações (17) e (14) são fundamentalmente diferentes. A equação (14) é a equação de movimento do operador densidade a uma partícula, do sistema de muitos corpos interagindo, ao passo que (17) é a equação de movimento do operador densidade a uma quase-partícula, isto é, uma partícula modificada pela interação com todas as outras.

Embora usualmente admita-se que estados de quase-partícula tem um sentido razoavelmente bem definido, quando se trata de situações com os sistemas muito perto do estado fundamental

(isto é, muito fracamente excitado), tal questão não aparece como regra geral definitivamente comprovada. Assim o problema sobre uma definição aceitável de estados de quase-partícula, pode considerar-se em aberto e dependerá da natureza da situação física em estudo (27); por exemplo, o método do campo auto-consistente generalizado, permite tratar sistemas em situações que envolvam grandes distorções no estado do sistema e excitações de rápida variação espacial (12,15).

Observemos nesta altura que a equação (15) com C nulo e ϕ e ψ sendo o potencial coulombiano, recuperamos simplesmente a aproximação de Hartree-Fock dependente do tempo (28). Nas mesmas condições, substituir $R^{(12)}$ pelo produto dos operadores densidades de primeira ordem, multiplicados por sua vez pela função de correlação de pares estática e em equilíbrio, corresponde ao tipo de tratamento de correlações eletrônicas, como proposto por Singwi e outros (29). O formalismo de L. Hedin (27,30) é possível de incorporar-se na forma da equação (15) (com $C = 0$), se a interação de troca, ψ , for o termo coulombiano blindado dinamicamente por uma constante dielétrica introduzida auto-consistentemente. De fato, em capítulos posteriores, usaremos os resultados de Hedin (27,30) para tratar o potencial de troca. O termo de interação direta será descrito pelo próprio potencial coulombiano.

A equação (17) é uma equação integro-diferencial para $\rho^{(4)}$ e pode ser resolvida através de um processo iterativo auto-consistente.

A hamiltoniana H pode ser escrita como

$$H(xt) = H_0(x) + W(x) + V(xt) \quad ,$$

onde H_0 é o termo de energia cinética; W descreve a interação com possíveis impurezas ou imperfeições, e V é a interação com a per

turbação externa, a qual o sistema esteja submetido.

Com esta hamiltoniana a equação de movimento que desejamos estudar, torna-se

$$\begin{aligned}
 i \frac{\partial \rho(xx't)}{\partial t} = & [H_0(x) - H_0^*(x')] \rho(xx't) \\
 & + [W(x) - W^*(x')] \rho(xx't) + [V(xt) - V^*(x't)] \rho(xx't) \\
 & + N \sum_{x_1} [(V_c(xx_1) - V_c(x'x'_1)) (\rho(xx't) \rho(x_1x'_1t))]_{x_1=x'_1} \\
 & - N \sum_{x_1} \{ [V_x(xx_1) - V_x(x'x'_1)] \rho(xx't) \rho(x_1x't) \}_{x_1=x'_1}
 \end{aligned}
 \tag{18}$$

onde omitimos o índice (1) porque de agora em diante só trataremos do operador densidade a uma quase-partícula.

Para sistemas em equilíbrio, $V(xt) = 0$, a equação (18) será escrita como

$$\begin{aligned}
 i \frac{\partial \rho_0(xx')}{\partial t} = & [H_0(x) - H_0^*(x')] \rho_0(xx') \\
 & + [W(x) - W^*(x')] \rho_0(xx') \\
 & + N \sum_{x_1} \{ [V_c(xx_1) - V_c(x'x'_1)] [\rho_0(xx') \rho_0(x_1x'_1)] \}_{x'_1 = x_1} \\
 & - N \sum_{x_1} \{ [V_x(xx_1) - V_x(x'x'_1)] \rho_0(xx'_1) \rho_0(x_1x') \}_{x'_1 = x_1}
 \end{aligned}$$

ou ainda

$$\begin{aligned}
 i \frac{\partial \rho_0(xx')}{\partial t} = & [\epsilon_0(x) - \epsilon_0^*(x')] \rho_0(xx') + \\
 & + [W(x) - W^*(x')] \rho_0(xx') ,
 \end{aligned}
 \tag{19}$$

onde introduzimos

$$\epsilon_0(x) = H_0(x) + V^{AC}(x) \quad , \quad (20)$$

sendo $V^{AC}(x)$ um potencial auto-consistente definido operacionalmente por

$$\begin{aligned} V^{AC} \rho_0(xx') &= N \sum_{x_1} [V_c(xx_1) \rho_0(x_1x'_1)]_{x_1=x'_1} \rho_0(xx') - \\ &- N \sum_{x_1} [V_x(xx_1) \rho_0(xx'_1) \rho_0(x_1x')]_{x'_1=x_1} \end{aligned} \quad (21)$$

Suponhamos que a perturbação externa dependente do tempo a que es
tã submetido o sistema, seja oscilante e introduzida adiabaticament
e, isto \bar{e} ,

$$V(t = -\infty) = 0$$

$$V(xt) = e^{\epsilon|t|} e^{-i\omega t} V(x,0), \quad \epsilon > 0, \quad \epsilon \rightarrow 0 \quad ,$$

sendo $V(x,0)$ um operador independente do tempo e ω a frequência da perturbação.

Em $t = -\infty$ o sistema está em equilíbrio, $\hat{\rho} = \hat{\rho}_0$, e em um tempo posterior, devido à interação com campos externos são in
duzidas flutuações, $\hat{\rho}_1$, em torno do equilíbrio, portanto

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}_0 + \hat{\rho}_1 \quad (22)$$

Substituindo a equação (22) na equação (18), desprezando
do termos de segunda ordem em $\hat{\rho}_1$, isto \bar{e} , nos restringimos à assim
chamada aproximação linear, e usando a equação (19) a equação de
movimento para a flutuação $\hat{\rho}_1$ será escrita como

$$\begin{aligned}
i \frac{\partial \rho_1(xx't)}{\partial t} = & [H_0(x) - H_0^*(x')] \rho_1(xx't) + \\
& + [W(x) - W^*(x')] \rho_1(xx't) + [V(x) - V^*(x')] \rho_0(xx') + \\
& + N \sum_{x_1} \left\{ [(V_c(xx_1) - V_c(x'_1x'_1))] (\rho_1(x_1x'_1t) \rho_0(xx') + \right. \\
& \left. + \rho_0(x_1x'_1) \rho_1(xx't)) \right\}_{x'_1=x_1} \\
& - N \sum_{x_1} \left\{ [(V_x(xx_1) - V_x(x'_1x'_1))] (\rho_0(xx'_1) \rho_1(x_1x't) + \rho_1(x_1x'_1t) \rho_0(x_1x'_1)) \right\}_{x'_1=x_1}
\end{aligned}
\tag{22}$$

Introduzindo o potencial auto-consistente definido pela equação (21), podemos reescrever a equação (22) como

$$\begin{aligned}
i \frac{\partial \rho_1(xx't)}{\partial t} = & [\epsilon_0(x) - \epsilon_0^*(x')] \rho_1(xx't) + \\
& + [W(x) - W^*(x')] \rho_1(xx't) + [V(x) - V^*(x')] \rho_0(xx') \\
& + [\delta\epsilon(x) - \delta\epsilon^*(x')] \rho_0(xx') ,
\end{aligned}
\tag{23}$$

sendo

$$\begin{aligned}
\delta\epsilon(x) \rho_0(xx') = & N \sum_{x_1} [V_c(xx_1) \rho_1(x_1x'_1t) \rho_0(xx')]_{x'_1=x'_1} \\
& - N \sum_{x_1} [V_x(xx_1) \rho_1(xx'_1t) \rho_0(x_1x')]_{x_1=x'_1}
\end{aligned}
\tag{24}$$

a variação no potencial auto-consistente induzida pelo potencial externo (efeitos de polarização).

5. O campo magnético - Equação de transporte independente do calibre

O campo magnético dá uma nova dimensão a uma grande variedade de fenômenos físicos, então, é de grande interesse incluí-lo explicitamente na equação de movimento da matriz densidade.

O sistema que pretendemos estudar é aquele constituído - por um gás de eletrons de condução em um cristal imerso em um campo magnético uniforme e constante, $\vec{B}_0 = \nabla \times \vec{A}$, sendo \vec{A} o potencial vetor.

O potencial vetor \vec{A} não é univocamente determinado pelo campo, uma vez que o gradiente de qualquer função escalar duas vezes diferenciável, $g(\vec{r})$, pode ser adicionada a \vec{A} sem mudar \vec{B}_0 . Uma tal variação em \vec{A} é referida como sendo uma transformação de calibre.

Devido à presença do campo magnético achamos conveniente escrever o elemento de matriz de um operador, \hat{O} , na representação da coordenada e spin, $x = (\vec{r}, \alpha)$, como:

$$O(\vec{r}_\alpha, \vec{r}'_{\alpha'}) = \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \{ \vec{k} n_\alpha | \hat{O} | \vec{k}' n'_{\alpha'} \} e^{-i\Lambda(\vec{r}, \vec{r}')} \phi_{\vec{k} n_\alpha}(\vec{r}) \phi_{\vec{k}' n'_{\alpha'}}^*(\vec{r}'), \quad (25)$$

ou o que é o mesmo

$$\{ \vec{k} n_\alpha | \hat{O} | \vec{k}' n'_{\alpha'} \} = \int d^3r d^3r' O(\vec{r}_\alpha, \vec{r}'_{\alpha'}) e^{i\Lambda(\vec{r}, \vec{r}')} \phi_{\vec{k} n_\alpha}^*(\vec{r}) \phi_{\vec{k}' n'_{\alpha'}}(\vec{r}'), \quad (26)$$

onde as $\phi_{\vec{k} n_\alpha}(\vec{r})$ são as funções de Bloch caracterizadas pelo número de onda \vec{k} , o índice de banda, n , e o índice de spin, α . A função de fase Λ é definida por

$$\Lambda(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{e}{c} [\vec{r} \cdot \vec{A}_0(\vec{R})] + \frac{e}{c} [g(\vec{r}) - g(\vec{r}')] , \quad (27)$$

onde

$$\vec{\xi} = \vec{r} - \vec{r}', \quad \vec{R} = \frac{\vec{r} + \vec{r}'}{2}, \quad \vec{A}_0(\vec{r}) = \frac{1}{2} \vec{B}_0 \times \vec{r} \quad e$$

$g(\vec{r})$ qualquer função duplamente diferenciável.

Representações semelhantes àquela definida pela equação (26), foram propostas por vários autores para estudar diferentes problemas de transporte (2,7,31).

Mostraremos que, nesta nova representação, a equação de movimento do operador densidade torna-se independente do calibre. No apêndice A faremos algumas considerações sobre a escolha da função de fase.

Uma propriedade muito importante para o que segue; da representação ora definida, se refere à hamiltoniana de banda

$$\epsilon_0(\vec{r}) = \frac{1}{2m} \left[-i \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + \frac{e}{c} \vec{A} \right]^2 + V_L(\vec{r}) + V^{AC}(\vec{r}), \quad (28)$$

onde $V_L(\vec{r})$ é o potencial da rede escrito explicitamente.

Com a representação definida pela equação (23), obtem-se

$$\{\vec{k} \ n \ \alpha | \epsilon_0 | \vec{k}' n' \alpha'\} =$$

$$= \iiint d^3r d^3r' \delta(\vec{r} - \vec{r}') \left\{ -\frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}'^2} + V_L(\vec{r}') + V^{AC}(\vec{r}') \right.$$

$$\left. - \frac{ie}{2mc} \frac{\partial}{\partial \vec{r}'} \cdot \vec{A}(\vec{r}') - \frac{ie}{2mc} \vec{A}(\vec{r}') \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}'} + \frac{e^2}{2mc^2} A^2(\vec{r}') \right\}$$

$$\times e^{i\Lambda(\vec{r}, \vec{r}')} \phi_{\vec{k}n\alpha}^*(\vec{r}) \phi_{\vec{k}'n'\alpha'}(\vec{r}')$$

$$\{\vec{k} n \alpha | \epsilon_0 | \vec{k}' n' \alpha'\} =$$

$$= \iiint d^3r d^3r' \delta(\vec{r}-\vec{r}') \left\{ \frac{e}{2m} \phi_{\vec{k}n\alpha}^*(\vec{r}) \left[-i \frac{\partial^2 \Lambda(\vec{r}, \vec{r}')}{\partial \vec{r}'^2} + \left(\frac{\partial \Lambda(\vec{r}, \vec{r}')}{\partial \vec{r}'} \right)^2 + \right. \right. \\ \left. + 2 \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}') \cdot \frac{\partial \Lambda}{\partial \vec{r}'} - i \frac{e}{c} \left(\frac{\partial}{\partial \vec{r}'} \cdot \vec{A}(\vec{r}') \right) + \frac{e^2}{c^2} A^2(\vec{r}') \right. \\ \left. + \left(-2i \frac{\partial \Lambda}{\partial \vec{r}'}(\vec{r}, \vec{r}') - \frac{2ie}{c} A(\vec{r}') \right) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}'} \right] \phi_{\vec{k}'n'\alpha'}(\vec{r}') \} \\ + \iiint d^3r d^3r' \delta(\vec{r}-\vec{r}') \left\{ \frac{e^{i\Lambda(\vec{r}, \vec{r}')}}{2m} \phi_{\vec{k}n\alpha}(\vec{r}) \left[-\frac{\partial^2}{\partial \vec{r}'^2} + \right. \right. \\ \left. \left. + 2mV_L(\vec{r}') + 2mV^{AC}(\vec{r}') \right] \phi_{\vec{k}'n'\alpha'}(\vec{r}') \right\} \quad (29)$$

Fazendo uso dos seguintes resultados:

$$\frac{\partial \Lambda(\vec{r}, \vec{r}')}{\partial \vec{r}'} = \frac{e}{c} \left[\frac{1}{2} \vec{B}_0 \times (\vec{r}-\vec{r}') - \vec{A}(\vec{r}') \right],$$

com $\vec{A}(\vec{r}) = \vec{A}_0(\vec{r}) + v_F \vec{g}(\vec{r})$ e $\Lambda(\vec{r}, \vec{r}')$ dado pela equação (27), o primeiro termo do segundo membro da equação (29) anula-se identicamente, e então

$$\{\vec{k}n\alpha | \epsilon_0 | \vec{k}'n'\alpha'\} = \int d^3r \phi_{\vec{k}n\alpha}^*(\vec{r}) \left[-\frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}'^2} + V_L(\vec{r}) + V^{AC}(\vec{r}) \right] \phi_{\vec{k}'n'\alpha'}(\vec{r}) \\ = \epsilon(\vec{k}n\alpha) \delta(\vec{k}\vec{k}') \delta(nn') \delta(\alpha\alpha'), \quad (30)$$

onde as $\epsilon(\vec{k}n\alpha)$ são as energias de Bloch do sistema de quase-partículas.

Observe-se que neste ponto, estamos restringindo o tratamento do problema ao caso do líquido de Fermi normal, ao excluir a possibilidade de existência de elementos de matriz não diagonais de

V^{AC} , entre funções de Bloch, diferentes de zero. A generalização do tratamento se faz permitindo que a hamiltoniana de uma quase-partícula

$$\langle \vec{k}_\alpha | \epsilon | \vec{k}'_{\alpha'} \rangle = \delta E(\rho) / \delta \langle \vec{k}'_{\alpha'} | \rho | \vec{k}_\alpha \rangle ,$$

com $\rho = \rho\{\epsilon\}$, não seja mais diagonal na representação de Bloch. Isto nos leva à versão generalizada do esquema de quase-partículas de Landau, que permite descrever, por exemplo, ordem magnética, ondas estáticas de carga, etc. no sistema (12,14,15,18,32-36).

Escolhendo x como sendo a representação de coordenada e spin, $x = (\vec{r}, \alpha)$, a equação (23) torna-se

$$i \frac{\partial \rho_1(\vec{r}_\alpha, \vec{r}'_{\alpha'}; t)}{\partial t} = [\epsilon_0(\vec{r}, \alpha) - \epsilon_0^*(\vec{r}'_{\alpha'})] \rho_1(\vec{r}_\alpha, \vec{r}'_{\alpha'}; t) + [V(\vec{r}_\alpha) - V^*(\vec{r}'_{\alpha'})] \rho_0(\vec{r}_\alpha, \vec{r}'_{\alpha'}) ,$$

onde $V = V + \delta\epsilon + W$.

Com a equação (25) pode-se escrever o primeiro termo do segundo membro como

$$[\epsilon_0(\vec{r}_\alpha) - \epsilon_0^*(\vec{r}'_{\alpha'})] \rho_1(\vec{r}_\alpha, \vec{r}'_{\alpha'}, t) = \sum_{\vec{k}\vec{k}'} F_{\vec{k}\vec{k}'}(\vec{r}_\alpha, \vec{r}'_{\alpha'}) \rho_1(\vec{k}_\alpha, \vec{k}'_{\alpha'}; t) ,$$

sendo

$$F_{\vec{k}\vec{k}'}(\vec{r}_\alpha, \vec{r}'_{\alpha'}) = [\epsilon_0(\vec{r}_\alpha) - \epsilon_0^*(\vec{r}'_{\alpha'})] e^{-i\Lambda(\vec{r}, \vec{r}')} \phi_{\vec{k}_\alpha}(\vec{r}) \phi_{\vec{k}'_{\alpha'}}^*(\vec{r}') \quad (31)$$

onde introduzimos a notação

$$\langle \vec{k}_\alpha | A | \vec{k}'_{\alpha'} \rangle = A(\vec{k}_\alpha, \vec{k}'_{\alpha'}) ,$$

e omitimos o índice de banda (\vec{k} está representando o par de índices (\vec{k}, n)).

Então

$$i \frac{\partial \rho_1(\vec{r}_\alpha, \vec{r}'_{\alpha'} t)}{\partial t} = \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} F_{\vec{k}, \vec{k}'}(\vec{r}_\alpha, \vec{r}'_{\alpha'}) \rho_1(\vec{k}_\alpha, \vec{k}'_{\alpha'}) + [V(\vec{r}_\alpha) - V^*(\vec{r}'_{\alpha'})] \rho_0(\vec{r}_\alpha, \vec{r}'_{\alpha'}) \quad (32)$$

Multiplicando-se ambos os membros da equação (32) por

$$e^{i\Lambda(\vec{r}, \vec{r}')} \phi_{\vec{k}_\alpha}^*(\vec{r}) \phi_{\vec{k}'_{\alpha'}}(\vec{r}'), \text{ obtem-se após integrar em } \vec{r} \text{ e } \vec{r}'$$

$$i \frac{\partial \rho_1(\vec{k}_\alpha, \vec{k}'_{\alpha'})}{\partial t} = \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}'_1} F_{\vec{k}_1, \vec{k}'_1}(\vec{k}_\alpha, \vec{k}'_{\alpha'}) \rho_1(\vec{k}_{1\alpha}, \vec{k}'_{1\alpha'}) + \{ \vec{k}_\alpha | [V(\vec{r}_\alpha) - V^*(\vec{r}'_{\alpha'})] \rho_0(\vec{r}_\alpha, \vec{r}'_{\alpha'}) | \vec{k}'_{\alpha'} \} \quad (33)$$

sendo

$$F_{\vec{k}_1, \vec{k}'_1}(\vec{k}_\alpha, \vec{k}'_{\alpha'}) = \iiint d^3r d^3r' F_{\vec{k}_1, \vec{k}'_1}(\vec{r}_\alpha, \vec{r}'_{\alpha'}) e^{i\Lambda(\vec{r}, \vec{r}')} \phi_{\vec{k}_\alpha}^*(\vec{r}) \phi_{\vec{k}'_{\alpha'}}(\vec{r}').$$

A função $F_{\vec{k}, \vec{k}'}(\vec{r}_\alpha, \vec{r}'_{\alpha'})$, definida pela equação (31) pode ser trabalhada substituindo-se nela a expressão de ϵ_0 , realizando-se as operações indicadas e reduzindo-se os termos semelhantes, de modo a obter

$$F_{\vec{k}_1, \vec{k}'_1}(\vec{r}_\alpha, \vec{r}'_{\alpha'}) = \frac{e^{-i\Lambda(\vec{r}, \vec{r}')}}{2m} \left[-\frac{\partial^2}{\partial \vec{r}^2} + 2m V_L(\vec{r}) + 2m V^{AC}(\vec{r}) + \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}'^2} - 2m V_L(\vec{r}') - 2m V^{AC}(\vec{r}') \right] \phi_{\vec{k}_{1\alpha}}(\vec{r}) \phi_{\vec{k}'_{1\alpha'}}^*(\vec{r}') - \frac{ie}{c} \vec{B}_0 \times (\vec{r} - \vec{r}') \cdot \left[\frac{\partial}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial}{\partial \vec{r}'} \right] \phi_{\vec{k}_{1\alpha}}(\vec{r}) \phi_{\vec{k}'_{1\alpha'}}^*(\vec{r}')$$

que leva a seguinte expressão para a sua transformada

$$\begin{aligned}
 F_{\vec{k}_1 \vec{k}_1'}(\vec{k}_\alpha \vec{k}'_{\alpha'}) &= \delta(\vec{k}_1 \vec{k}_1') \delta(\vec{k} \vec{k}') [\epsilon(\vec{k}_\alpha) - \epsilon(\vec{k}'_{\alpha'})] \\
 &- \frac{ie}{2mc} \iint d^3r d^3r' \phi_{\vec{k}_\alpha}^*(\vec{r}) \phi_{\vec{k}'_{\alpha'}}(\vec{r}') [\vec{B}_0 \times (\vec{r} - \vec{r}') \cdot \\
 &\cdot \left(\frac{\partial}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial}{\partial \vec{r}'} \right)] \phi_{\vec{k}_1 \alpha}(\vec{r}) \phi_{\vec{k}_1' \alpha'}^*(\vec{r}') .
 \end{aligned} \quad (34)$$

Fazendo uso dos resultados (37,38)

$$\begin{aligned}
 \langle \vec{k}_\alpha | -i \frac{\partial}{\partial \vec{r}} | \vec{k}'_{\alpha'} \rangle &= m^* \vec{v}_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k}_\alpha) \delta(\vec{k} \vec{k}') \delta(\alpha \alpha') \\
 &= m^* \vec{u}_{\vec{k}_\alpha} \delta(\vec{k} \vec{k}') \delta(\alpha \alpha')
 \end{aligned} \quad (35)$$

sendo $\vec{u}_{\vec{k}_\alpha} = \vec{v}_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k}_\alpha)$ a velocidade das quase-partículas, e

$$\langle \vec{k}_\alpha | \vec{r} | \vec{k}'_{\alpha'} \rangle = -i \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \delta(\vec{k} \vec{k}') \delta(\alpha \alpha') + i J_{\alpha \alpha'}(\vec{k} \vec{k}') \delta(\vec{k} \vec{k}') \quad (36)$$

com

$$J_{\alpha \alpha'} = \int e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}} \psi_{\vec{k}'_{\alpha'}}^*(\vec{r}) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \psi_{\vec{k}_\alpha}(\vec{r}) d^3r$$

onde $\psi_{\vec{k}_\alpha}(\vec{r})$ é a parte periódica da função de Bloch, isto é,

$\phi_{\vec{k}_\alpha}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \psi_{\vec{k}_\alpha}(\vec{r})$, a equação (34) será reescrita como

$$\begin{aligned}
 F_{\vec{k}_1 \vec{k}_1'}(\vec{k}_\alpha \vec{k}'_{\alpha'}) &= \delta(\vec{k}_1 \vec{k}_1') \delta(\vec{k}_1, \vec{k}) \left\{ [\epsilon(\vec{k}_\alpha) - \epsilon(\vec{k}'_{\alpha'})] \right. \\
 &- \left. \frac{ie}{2c} \vec{B}_0 \times (\vec{u}_{\vec{k}_\alpha} + \vec{u}_{\vec{k}'_{\alpha'}}) \cdot (\vec{v}_{\vec{k}} + \vec{v}_{\vec{k}'}) \right\} ,
 \end{aligned} \quad 37$$

(A contribuição da integral J desaparece identicamente).

Com o resultado (37) a equação (33) torna-se:

$$\begin{aligned}
i \frac{\partial}{\partial t} \rho_1(\vec{k}_\alpha, \vec{k}'_{\alpha'}) = & \\
= \{ \epsilon(\vec{k}_\alpha) - \epsilon(\vec{k}'_{\alpha'}) - \frac{ie}{2c} [\vec{B}_0 \times (\vec{u}_{\vec{k}_\alpha} + \vec{u}_{\vec{k}'_{\alpha'}})] \cdot (\nabla_{\vec{k}} + \nabla_{\vec{k}'}) \} \rho_1(\vec{k}_\alpha, \vec{k}'_{\alpha'}) & \\
+ \{ k_\alpha | (V(\vec{r}'_{\alpha'}) - V^*(\vec{r}'_{\alpha'})) \rho_0(\vec{r}_\alpha \vec{r}'_{\alpha'}) | \vec{k}'_{\alpha'} \} & \quad (38)
\end{aligned}$$

Analisemos agora o segundo membro da equação (38) considerando cada contribuição separadamente; a variação no potencial auto-consistente, $\delta\epsilon$, a interação com campos externos, $V(\vec{r}s)$; o termo de colisão, W .

Retomemos a definição operacional de $\delta\epsilon$ (equação 24), que agora toma a forma

$$\begin{aligned}
\delta\epsilon(\vec{r}_\alpha) \rho_0(\vec{r}_\alpha \vec{r}'_{\alpha'}) = N \sum_{\alpha_1} \left[\int d^3 r_1 V_c(\vec{r}, \vec{r}'_1) \right. & \\
\left. \times \rho_1(\vec{r}_1 \alpha_1, \vec{r}'_1 \alpha'_1) \rho_0(\vec{r}_\alpha \vec{r}'_{\alpha'}) \right]_{\vec{r}_1 = \vec{r}, \alpha_1 = \alpha'_1} & \\
= N \sum_{\alpha_1} \left[\int d^3 r_1 V_x(\vec{r} \vec{r}_1) \rho_1(\vec{r}_\alpha \vec{r}_1 \alpha_1) \rho_0(\vec{r}'_1 \alpha'_1, \vec{r}'_{\alpha'}) \right]_{\substack{\vec{r}_1 = \vec{r} \\ \alpha_1 = \alpha'_1}} &
\end{aligned}$$

Escrevendo ρ_1 e ρ_0 na nova representação, obtem-se após multiplicar por

$e^{i\Lambda(\vec{r}\vec{r}')} \phi_{\vec{k}_\alpha}^*(\vec{r}) \phi_{\vec{k}'_{\alpha'}}(\vec{r}')$ e integrar em \vec{r} e \vec{r}' :

$$\begin{aligned}
\{ \vec{k}_\alpha | \delta\epsilon \rho_0 | \vec{k}'_{\alpha'} \} = N \sum_{\beta} \sum_{\vec{p}\vec{p}', \vec{p}_1 \vec{p}'_1} \iiint d^3 r d^3 r' d^3 r_1 V_c(\vec{r} \vec{r}_1) & \\
\times (e^{-i\Lambda(\vec{r}_1 \vec{r}'_1)} \phi_{\vec{p}_1 \beta}(\vec{r}_1) \phi_{\vec{p}'_1 \beta'}^*(\vec{r}'_1) \rho_1(\vec{p}_1 \beta, \vec{p}'_1 \beta')) & \\
\times e^{-i\Lambda(\vec{r} \vec{r}')} \phi_{\vec{p}_\alpha}(\vec{r}) \phi_{\vec{p}'_{\alpha'}}^*(\vec{r}') \rho_0(\vec{p}_\alpha, \vec{p}'_{\alpha'}) & \\
\times e^{i\Lambda(\vec{r} \vec{r}')} \phi_{\vec{k}_\alpha}^*(\vec{r}) \phi_{\vec{k}'_{\alpha'}}(\vec{r}') \Big|_{\vec{r}_1 = \vec{r}, \beta = \beta'} &
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - N \sum_{\beta} \sum_{\vec{p}\vec{p}'\vec{p}_1\vec{p}'_1} \iiint d^3r d^3r' d^3r_1 V_X(\vec{r}\vec{r}_1) e^{-i\Lambda(\vec{r}\vec{r}_1)} \phi_{\vec{p}\alpha}(\vec{r}) \phi_{\vec{p}_1\beta}^*(\vec{r}_1) \\
& \times \rho_1(\vec{p}\alpha, \vec{p}_1\beta) e^{-i\Lambda(\vec{r}'_1\vec{r}_1)} \phi_{\vec{p}'_1\beta'}(\vec{r}'_1) \phi_{\vec{p}'\alpha'}^*(\vec{r}') \rho_0(\vec{p}'_1\beta', \vec{p}'\alpha') \\
& \times e^{i\Lambda(\vec{r}\vec{r}')} \phi_{\vec{k}\alpha}^*(\vec{r}) \phi_{\vec{k}'\alpha'}(\vec{r}') \Big|_{\vec{r}_1=\vec{r}'_1}, \beta = \beta'
\end{aligned} \tag{39}$$

Dois resultados simplificam a equação (39):

a) Demonstrou-se anteriormente que a hamiltoniana de banda, ϵ_0 , é diagonal na nova representação, consequentemente, como ρ_0 , matriz densidade para o sistema em equilíbrio sô é função de ϵ_0 obtem-se

$$\rho_0(\vec{p}\beta, \vec{p}'\beta') = n_{\vec{p}\beta} \delta_{\vec{p}\vec{p}'} \delta_{\beta\beta'}$$

onde $n_{\vec{p}\beta}$ é a função de distribuição de Fermi-Dirac,

b) Com algumas manipulações algébricas pode-se, a partir da equação (27), demonstrar a relação

$$\Lambda(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Lambda(\vec{r}_1, \vec{r}_3) + \Lambda(\vec{r}_3, \vec{r}_2) + \lambda(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3),$$

com

$$\lambda(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3) = \frac{e\vec{B}_0}{2c} \cdot [(\vec{r}_2 - \vec{r}_3) \times (\vec{r}_1 - \vec{r}_3)] \tag{40}$$

Com estas considerações, e fazendo uso das relação de ortonormalidade entre as funções de Bloch, obtem-se (absorvendo o número de partículas, N, nos potenciais V_C e V_X)

$$\{\vec{k}_\alpha | \delta \epsilon \rho_0 | \vec{k}'_{\alpha'}\} =$$

$$= n_{\vec{k}'_{\alpha'}} \delta(\alpha\alpha') \sum_{\vec{p}_1 \vec{p}'_1 \beta} \langle \vec{k}_\alpha, \vec{p}'_1 \beta' | V_c | \vec{k}'_{\alpha'}, \vec{p}_1 \beta \rangle$$

$$\times \rho_1(\vec{p}_1 \beta, \vec{p}'_1 \beta') \delta(\beta\beta')$$

$$- \sum_{\vec{p}\vec{p}'\vec{p}_1\vec{p}'_1\beta} \iiint d^3r d^3r' d^3r_1 \phi_{\vec{p}_1\beta}^*(\vec{r}_1) \phi_{\vec{p}'_1\beta'}^*(\vec{r}') \phi_{\vec{k}_\alpha}^*(\vec{r}) e^{i\lambda(\vec{r}\vec{r}'\vec{r}_1)}$$

$$\times V_x(\vec{r}\vec{r}_1) \phi_{\vec{p}_\alpha}(\vec{r}) \phi_{\vec{p}'_1\beta'}(\vec{r}'_1) \phi_{\vec{k}'_{\alpha'}}(\vec{r}')$$

$$\times \rho_1(\vec{p}_\alpha \vec{p}_1 \beta) n_{\vec{p}'_1 \beta'} \delta(\vec{p}_1 \vec{p}') \delta(\beta' \alpha') \delta(\beta \beta') \quad (41)$$

A expressão para $\delta \epsilon^*(\vec{r}'_{\alpha'}) \rho_0(\vec{r}_\alpha \vec{r}'_{\alpha'})$ é obtida substituindo-se $\vec{r} \leftrightarrow \vec{r}'$, $\vec{k} \leftrightarrow \vec{k}'$, $\alpha \leftrightarrow \alpha'$ na equação (41).

Consideremos agora o termo envolvendo a perturbação externa.

Na maior parte dos casos de interesse $V(\vec{r}s)$ é, ou uma função das coordenadas (e eventualmente do spin) e/ou das velocidades. Para interações deste tipo obtem-se

$$\{\vec{k}_\alpha | [V(\vec{r}_\alpha) - V^*(\vec{r}'_{\alpha'})] \rho_0 | \vec{k}'_{\alpha'}\}$$

$$= (n_{\vec{k}'_{\alpha'}} - n_{\vec{k}_\alpha}) \langle \vec{k}_\alpha | V | \vec{k}'_{\alpha'} \rangle. \quad (42)$$

Coletando os resultados até aqui obtidos, estamos agora em condições de escrever a equação de transporte para a matriz densidade de uma quase-partícula de Landau, no contexto do método do campo auto-consistente generalizado ⁽¹²⁾, cuja forma completa está escrita na página (30). Na equação (43) designamos por $J_{col} \{ \rho \}$ a contribuição dos termos de colisão tratada com algum detalhe no apêndice B.

$$\begin{aligned}
& \left\{ i \frac{\partial}{\partial t} - \epsilon(\vec{k}_\alpha) + \epsilon(\vec{k}'_{\alpha'}) + \frac{ie}{2c} [\vec{B}_0 \times (\vec{u}_{\vec{k}_\alpha} + \vec{u}_{\vec{k}'_{\alpha'}})] \cdot (\nabla_{\vec{k}} + \nabla_{\vec{k}'}) \right\} \rho_1(\vec{k}_\alpha \vec{k}'_{\alpha'}) + \\
& + (n_{\vec{k}_\alpha} - n_{\vec{k}'_{\alpha'}}) \sum_{\vec{p}_\beta \vec{p}'_{\beta'}} < \vec{p}_\beta, \vec{k}_\alpha | V_c | \vec{k}'_{\alpha'}, \vec{p}'_{\beta'} > \rho_1(\vec{p}_\beta \vec{p}'_{\beta'}) \delta(\alpha\alpha') \delta(\beta\beta') \\
& - \sum_{\vec{p}_\beta \vec{p}'_{\beta'} \vec{p}_1 \vec{p}'_{1\beta}} \iiint d^3r d^3r' d^3r_1 \phi_{\vec{p}_1\beta}^*(\vec{r}_1) \phi_{\vec{p}'_{1\beta'}}^*(\vec{r}') \phi_{\vec{k}_\alpha}^*(\vec{r}) e^{i\lambda(\vec{r}\vec{r}'\vec{r}_1)} v_x(\vec{r}, \vec{r}_1) \phi_{\vec{p}_\alpha}(\vec{r}) \phi_{\vec{p}'_{1\beta'}}(\vec{r}_1) \\
& \phi_{\vec{k}'_{\alpha'}}(\vec{r}') \rho_1(\vec{p}_\alpha, \vec{p}_1\beta) n_{\vec{p}'_{1\beta'}} \delta(\vec{p}'_1 \vec{p}') \delta(\beta'\alpha') \delta(\beta\beta') + \\
& + \text{mesmo termo com } (\vec{r}\vec{k}_\alpha) \leftrightarrow (\vec{r}'\vec{k}'_{\alpha'}) \\
& = (n_{\vec{k}'_{\alpha'}} - n_{\vec{k}_\alpha}) < \vec{k}_\alpha | V | \vec{k}'_{\alpha'} > + J_{col} \{ \rho \}
\end{aligned}$$

(43)

6. Efeitos de blindagem e uma forma simplificada da equação de transporte

A equação de transporte deduzida pode ser colocada em uma forma mais conveniente através das seguintes considerações. — Devido a efeitos de correlação, o potencial de troca $V_X(\vec{r}\vec{r}')$, é blindado (27). Seja J_S o inverso do comprimento de blindagem. A ordem de grandeza de λ , definido pela equação (40) e que afeta diretamente na equação de transporte, o termo relacionado com o potencial de troca, é dada por $1/\lambda_c^2 J_S^2$, onde definimos um "comprimento magnético" $\lambda_c = (c/eB_0)^{1/2}$. Se os valores do campo magnético e comprimento de blindagem forem tais que $\lambda_c J_S \ll 1$, este termo afetará muito pouco a equação de transporte, pois a rápida variação do fator de fase tende a cancelá-lo. Este resultado é corroborado pelo seguinte raciocínio clássico: elétrons livres em campo magnético descrevem uma hélice em torno do campo cuja projeção no plano perpendicular ao campo são círculos de raio $R = mv/eB_0$ (onde v é a velocidade do elétron). Se o campo magnético for tal que o raio ciclotrônico, R , seja muito menor que a distância inter-eletrônica média ($\lambda_c J_S \ll 1$) é de se esperar que os elétrons se movimentem em torno do campo sem sentir muito a influência dos outros.

Diminuindo-se a distância inter-eletrônica média, as funções de onda dos elétrons tendem a se sobrepor e o movimento de cada um, deve ser fortemente influenciado pelos restantes. Para interação de curto alcance e campos magnéticos razoáveis tem-se $\lambda_c J_S \gg 1$, o que nos permite fazer a expansão $e^{i\lambda} \approx 1 + i\lambda$.

Considerando, na equação de transporte o termo que contém o fator $e^{i\lambda}$ e expandindo-o, como indicado, resulta

$$\begin{aligned}
& n_{\vec{k}, \alpha} \sum_{\vec{p}, \vec{p}_1} \langle \vec{p}_1 \alpha', \vec{k}_\alpha | V_X | \vec{p}_\alpha, \vec{k}' \alpha' \rangle \rho_1(\vec{p}_\alpha, \vec{p}_1 \alpha') \\
& + \frac{ie\vec{B}_0}{2c} \cdot \sum_{\vec{p}, \vec{p}_1, \vec{p}_1', \vec{p}_1''} \iiint d^3r d^3r' d^3r_1 [\phi_{\vec{p}, \beta}^*(\vec{r}_1) \phi_{\vec{p}_1, \alpha'}^*(\vec{r}') \phi_{\vec{k}_\alpha}^*(\vec{r}) \\
& \times V_X(\vec{r} - \vec{r}_1) \{ \vec{r}' \times (\vec{r} - \vec{r}_1) - \vec{r}_1 \times \vec{r} \} \phi_{\vec{p}_\alpha}(\vec{r}) \phi_{\vec{p}_1', \beta}(\vec{r}_1') \phi_{\vec{k}', \alpha'}(\vec{r}')] \\
& \times \rho_1(\vec{p}_\alpha, \vec{p}_1 \beta) \delta(\vec{p}' \vec{p}_1) \delta(\beta' \alpha') \delta(\beta \beta')
\end{aligned} \tag{44}$$

Com as equações (35) e (36), a segunda parcela da expressão (44), pode depois de algumas manipulações matemáticas, ser escrita como

$$\begin{aligned}
& i \frac{e\vec{B}_0}{2c} \times \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \cdot \left[\frac{\partial}{\partial \vec{k}} + \frac{\partial}{\partial \vec{k}'} \right] n_{\vec{k}, \alpha} \\
& \times \sum_{\vec{p}, \vec{p}_1, \vec{p}_1'} \langle \vec{k}_\alpha, \vec{p}_1' \beta' | V_X | \vec{k}' \alpha', \vec{p}_\beta \rangle \rho_1(\vec{p}_\beta, \vec{p}_1' \beta') \\
& \times \delta(\beta \alpha) \delta(\beta' \alpha') \delta(\vec{k} + \vec{p}', \vec{k}' + \vec{p}) .
\end{aligned}$$

A equação (43) toma então a forma dada na equação (45) escrita na página seguinte.

7. O limite clássico e a equação de Boltzmann

Negligenciando o spin e considerando um gás de partículas não interagindo, a equação (45) torna-se

$$\begin{aligned}
& \left\{ i \frac{\partial}{\partial t} - \epsilon(\vec{k}) + \epsilon(\vec{k}') + \frac{ie}{2c} [\vec{B}_0 \times (\vec{u}_{\vec{k}} + \vec{u}_{\vec{k}'})] \cdot (\nabla_{\vec{k}} + \nabla_{\vec{k}'}) \right\} \rho_1(\vec{k}, \vec{k}') \\
& = (n_{\vec{k}} - n_{\vec{k}'}) \langle \vec{k} | V | \vec{k}' \rangle + J_{col} \{ \rho \}
\end{aligned} \tag{46}$$

$$\left\{ i \frac{\partial}{\partial t} - \epsilon(\vec{k}_\alpha) + \epsilon(\vec{k}'_{\alpha'}) \right\} + \frac{ie}{2c} \left[\vec{B}_0 \times (\vec{u}_{\vec{k}_\alpha} + \vec{u}_{\vec{k}'_{\alpha'}}) \right] \cdot (\nabla_{\vec{k}} + \nabla_{\vec{k}'}) \} \rho_1(\vec{k}_\alpha, \vec{k}'_{\alpha'}) +$$

$$+ (n_{\vec{k}_\alpha} - n_{\vec{k}'_{\alpha'}}) \sum_{\vec{p}_\beta, \vec{p}'_{\beta'}} \langle \vec{p}_\beta, \vec{k}_\alpha | V_c | \vec{k}'_{\alpha'}, \vec{p}'_{\beta'} \rangle \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\beta\beta'} \rho_1(\vec{p}_\beta, \vec{p}'_{\beta'})$$

$$- \{ (n_{\vec{k}_\alpha} - n_{\vec{k}'_{\alpha'}}) + \frac{ie}{2c} [\vec{B}_0 \times (\vec{u}_{\vec{k}_\alpha} + \vec{u}_{\vec{k}'_{\alpha'}})] \cdot \left(\frac{\partial n_{\vec{k}'_{\alpha'}}}{\partial \epsilon_{\vec{k}'_{\alpha'}}} \nabla_{\vec{k}} + \frac{\partial n_{\vec{k}'_{\alpha'}}}{\partial \epsilon_{\vec{k}'_{\alpha'}}} \nabla_{\vec{k}'} \right) \}$$

$$\sum_{\vec{p}_\beta, \vec{p}'_{\beta'}} \langle \vec{k}_\alpha, \vec{p}_\beta | V_x | \vec{k}'_{\alpha'}, \vec{p}'_{\beta'} \rangle \delta_{\alpha'\beta} \delta_{\alpha\beta'} \delta(\vec{k} + \vec{p}', \vec{k}' + \vec{p}) \rho_1(\vec{p}_\beta, \vec{p}'_{\beta'}) =$$

$$= (n_{\vec{k}'_{\alpha'}} - n_{\vec{k}_\alpha}) \langle \vec{k}_\alpha | V | \vec{k}'_{\alpha'} \rangle + J_{col} \{ \rho \}$$

Introduzindo as variáveis \vec{k} e \vec{q} definidas por

$$\vec{k} = \vec{k} + \vec{q}/2, \quad \vec{k}' = \vec{k} - \vec{q}/2 \quad , \quad (47)$$

a equação (46) adquire a forma

$$\begin{aligned} & \left[i \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{m} + \frac{ie}{c} (\vec{B}_0 \times \frac{\vec{k}}{m}) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \right] \{ \vec{k} + \vec{q}/2 | \rho_1 | \vec{k} - \vec{q}/2 \} = \\ & = \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{m} \frac{\partial n(\epsilon)}{\partial \epsilon} \langle \vec{k} + \vec{q}/2 | V | \vec{k} - \vec{q}/2 \rangle + J_{col} \{ \rho \} \end{aligned} \quad (48)$$

para uma relação energia-momento parabólica.

Identificando

$$\{ \vec{k} + \vec{q}/2 | \rho_1 | \vec{k} - \vec{q}/2 \} = \int d^2 \vec{r} e^{i \vec{q} \cdot \vec{r}} f_{\vec{k}}(\vec{r}, t) \quad (49)$$

sendo $f_{\vec{k}}(\vec{r}, t)$ a função de distribuição de Boltzmann, a equação (48) torna-se a equação de Boltzmann já muito usada para estudar uma grande variedade de fenômenos de transporte em metais (3,4).

8. Equação fenomenológica de Silin

Fixando $\alpha = +$ e $\alpha' = +$ a equação (45) torna-se

$$\begin{aligned} & \left[i \frac{\partial}{\partial t} - \epsilon(\vec{k}_+) + \epsilon(\vec{k}_+) - \frac{\vec{q}}{2} \cdot \nabla_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k}) \right. \\ & \left. + i \frac{e \vec{B}_0}{c} \times \nabla_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{k}} \right] \rho_1(\vec{k}, \vec{q}, ++) \end{aligned}$$

$$- \left\{ n_{\vec{k}\uparrow} - n_{\vec{k}\downarrow} + \vec{q} \cdot \nabla_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \right.$$

$$\left. + \left[i \frac{e \vec{B}_0}{c} \times \nabla_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k}) \right] \cdot \nabla_{\vec{k}} \right\}$$

$$\times \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} \langle \vec{k} + \vec{q}/2 \uparrow, \vec{p} \uparrow | V | \vec{k} - \vec{q}/2 \uparrow, \vec{p}' \uparrow \rangle \rho_1(\vec{p} \uparrow, \vec{p}' \uparrow)$$

$$= \left[n_{\vec{k}\uparrow} - n_{\vec{k}\downarrow} + \vec{q} \cdot \nabla_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \right] \langle \vec{k} + \vec{q}/2 \uparrow | V | \vec{k} - \vec{q}/2 \uparrow \rangle + J_{col}(\rho) \quad (50)$$

onde \vec{k} e \vec{q} foram definidos pela equação (47) e introduzimos a notação

$$\rho_1(\vec{k}, \vec{q}, \uparrow \uparrow) \equiv \langle \vec{k} + \vec{q}/2 \uparrow | \rho_1 | \vec{k} - \vec{q}/2 \uparrow \rangle$$

Admitindo que as populações com diferentes orientações de spin sejam tais que

$$n_{\vec{k}\uparrow} - n_{\vec{k}\downarrow} = \tilde{\omega}_0 \frac{\partial n}{\partial \epsilon}$$

com

$$\tilde{\omega}_0 = \epsilon_{\vec{k}\uparrow} - \epsilon_{\vec{k}\downarrow}$$

sendo a energia necessária para inverter o spin de cada quase-elétron (ver capítulo VI), a equação (50) pode ser reescrita em uma forma mais compacta como

$$\begin{aligned} i \frac{\partial \rho(\vec{k}, \vec{q}, \uparrow \uparrow)}{\partial t} &= (\tilde{\omega}_0 + \vec{q} \cdot \nabla_{\vec{k}} + \frac{ie}{c} (\vec{B}_0 \times \vec{u}_{\vec{k}}) \cdot \nabla_{\vec{k}}) (\rho + \delta \epsilon) \\ &= \tilde{\omega}_0 (\vec{q} \cdot \nabla_{\vec{k}}) \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \langle \vec{k} + \vec{q}/2 \uparrow | V | \vec{k} - \vec{q}/2 \uparrow \rangle + J_{col} \end{aligned} \quad (50a)$$

que coincide com a equação de Silin ⁽¹⁰⁾, na forma usada por Platzman e Wolff ⁽¹³⁾ para explicar os resultados experimentais de

Schultz e Dunifer (11), sendo

$$\delta \epsilon = \frac{\partial n_{\vec{k}}}{\partial \epsilon_{\vec{k}}} \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} \langle \vec{k} + \vec{q}/2, \vec{p} | V_x | \vec{k} - \vec{q}/2, \vec{p}' \rangle \rho_1(\vec{p}, \vec{p}').$$

9. Equação de transporte na geometria paralela com uma forma particular para o potencial de troca.

Se na equação (45), supormos, no termo envolvendo a troca de spins, o potencial de interação do tipo de contacto ($V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = U \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ sendo U uma constante) nenhum termo do tipo de Lorentz aparecerá envolvido com a interação.

Fixando ainda $\alpha = \uparrow$ e $\alpha' = \downarrow$, a equação (45) torna-se

$$\left\{ i \frac{\partial}{\partial t} - \epsilon(\vec{k}\uparrow) + \epsilon(\vec{k}'\downarrow) + \frac{ie}{2c} [\vec{B}_0 \times (\vec{u}_{\vec{k}\uparrow} + \vec{u}_{\vec{k}'\downarrow})] \cdot (\nabla_{\vec{k}} + \nabla_{\vec{k}'}) \right\} \rho_1(\vec{k}\uparrow, \vec{k}'\downarrow) - \frac{U}{N} (n_{\vec{k}\uparrow} - n_{\vec{k}'\downarrow}) \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} \rho_1(\vec{p}\uparrow, \vec{p}'\downarrow) = (n_{\vec{k}\uparrow} - n_{\vec{k}'\downarrow}) \langle \vec{k}\uparrow | V | \vec{k}'\downarrow \rangle + J_{col} \quad (51)$$

Para $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{q}$, sendo \vec{q} o momento transferido ao sistema no processo de interação e para uma geometria experimental tal que $\vec{q} \parallel \vec{B}_0$ (geometria paralela) a equação (51) torna-se

$$\begin{aligned} & [\omega - \epsilon(\vec{k}\uparrow) + \epsilon(\vec{k}+\vec{q}\downarrow)] \rho(\vec{k}\vec{q}\uparrow\downarrow) \\ & - (n_{\vec{k}\uparrow} - n_{\vec{k}+\vec{q}\downarrow}) \cdot \frac{U}{N} \sum_{\vec{k}'} \rho(\vec{k}'\vec{q}\omega\uparrow\downarrow) \\ & = (n_{\vec{k}\uparrow} - n_{\vec{k}+\vec{q}\downarrow}) \langle \vec{k}\uparrow | V | \vec{k}+\vec{q}\downarrow \rangle + J_{col} \end{aligned} \quad (52)$$

onde ω é a frequência do campo externo suposto oscilante.

A equação (52) coincide com a equação utilizada por Luzzi e De Graaf (19) para cálculos de ressonâncias de spin no gás de elétrons.

10. O termo de Lorentz e o potencial de interação

Ressaltemos para finalizar, dois aspectos importantes da equação (45) : a presença da velocidade das quase-partículas no termo de Lorentz e um termo do tipo de Lorentz envolvido com a interação entre as quase-partículas. Estes resultados tem sido objeto de controvérsias entre alguns autores (1,2). Vamos resumir a seguir, o que os nossos resultados mostram. A energia das quase-partículas, ϵ , foi definida somando-se a energia cinética a interação com as outras partículas, através de um potencial auto-consistente V^{AC} , no qual podemos distinguir duas contribuições: a interação direta eletron-eletron e o termo de intercâmbio.

No espaço \vec{k} escrevamos a energia das quase-partículas como $\epsilon(\vec{k}_\alpha) = \epsilon_0(\vec{k}_\alpha) + v(\vec{k}_\alpha)$ onde em $\epsilon_0(\vec{k}_\alpha)$ juntamos a energia cinética o termo de interação direta e em $v(\vec{k}_\alpha)$ temos apenas o termo de intercâmbio.

O cálculo de Hartree-Fock para o gás de eletrons resulta em (39)

$$\epsilon_0(k_\alpha) = k^2/2m \quad ,$$

$$v(k_\alpha) = - \frac{e^2 k_F}{2\pi} \left[2 + \frac{k_F^2 - k^2}{kk_F} \ln \left| \frac{k+k_F}{k-k_F} \right| \right] \quad , \quad (53)$$

(sendo k_F o momento de Fermi), portanto, $\nabla_{\vec{k}} v(\vec{k}_\alpha)$ tem uma singularidade logarítmica em $k = k_F$.

Entretanto, Hedin (30), mostrou, por meio de um novo método para calcular as funções de Green a um eletron em densidades metálicas, que efeitos de correlação poderiam tornar $v(\vec{k}_\alpha)$ quase independente de k (que representa, no espaço direto uma interação de alcance muito curto). Isto implica que

$$\vec{u}_{\vec{k}_\alpha} = \nabla_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k}_\alpha) = \nabla_{\vec{k}} \epsilon_0(\vec{k}_\alpha) \quad \text{ou} \quad \vec{u}_{\vec{k}_\alpha} = \vec{k}/m$$

na representação de onda plana.

Dentro do esquema de Hedin pode-se, na equação de transporte, substituir a velocidade das quase-partículas pela velocidade das partículas livres. É claro também que, neste caso, o termo de Lorentz envolvido com a interação será desprezível. Reobtemos neste limite os resultados da referência (1).

11. Conclusões

A equação (43) (ou (45) se considerarmos interação de curto alcance) é então a equação básica para se obter o operador densidade a uma quase-partícula na presença de um campo magnético uniforme e constante. Na sua dedução foi introduzida uma representação especial para o operador densidade. Esta representação tem a vantagem de permitir trabalhar no espaço \vec{k} . A equação de transporte obtida é invariante por uma transformação de calibre e não está restrita a longos comprimentos de onda, pois tanto \vec{k} quanto \vec{k}' são quaisquer vetores na primeira zona de Brillouin.

Resolvendo a equação de transporte, determinamos a dependência temporal, espacial e de spin do operador densidade a uma quase-partícula, o que nos permitirá calcular o valor médio de observáveis que envolvam uma partícula.

De fato, a solução da equação de transporte generalizada para a matriz densidade de uma quase-partícula de Landau proporciona toda a informação necessária para determinar, na aproximação linear, susceptibilidades generalizadas (dependentes de coordenada, spin e tempo) do líquido de Fermi. Estas susceptibilidades generalizadas podem, via o teorema da flutuação dissipação, ser relacionadas a funções de correlação, importantes e inevitáveis na descrição de medidas experimentais (40).

Uma aplicação que nos interessa particularmente é o

relacionamento com a secção de espalhamento. Este será o objetivo do capítulo III.

C A P Í T U L O I I I

A SECÇÃO DE ESPALHAMENTO

1. Introdução

Experiências de espalhamento são freqüentemente usadas para se obter informações sobre a estrutura dos sistemas de muitos corpos⁽¹⁾.

Introduzimos neste capítulo, um método para calcular a secção de espalhamento.

O formalismo de Van Hove⁽²⁾ é usado para expressar a secção de espalhamento em termos do operador densidade a uma quase-partícula.

A presença de um campo magnético uniforme e constante é incluída e tratada através da representação introduzida no capítulo anterior.

2. Secção de Espalhamento

A interação de um sistema de N eletrons de condução, como aquele constituído pelos portadores em um semiconductor dopado (tipo n), na presença de um campo magnético uniforme e constante \vec{B}_0 , com um campo de radiação caracterizado pelo potencial vector \vec{A} , é descrita pela hamiltoniana⁽³⁾

$$H_{int} = - \frac{1}{c} \int d^3\vec{r} \vec{A}(\vec{r}, t) \cdot \vec{J}(\vec{r}, t), \quad (1)$$

onde \vec{J} é o operador densidade de corrente

$$\vec{J}(\vec{r}) = -\frac{e}{2m} \sum_{j=1}^N \vec{p}_j \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) + \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) \vec{p}_j$$

$$= -\frac{e^2}{2mc} \sum_{j=1}^N \vec{A}(\vec{r}_j, t) \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) \quad (2)$$

sendo \vec{p}_j o operador momento canônico, (podendo, se necessário, incluir o termo de interação spin-órbita).

Consideremos o espalhamento inelástico de um foton de vetor de onda \vec{k}_L e frequência ω_L para um estado (\vec{k}_S, ω_S) , esquematizado na figura III-1.

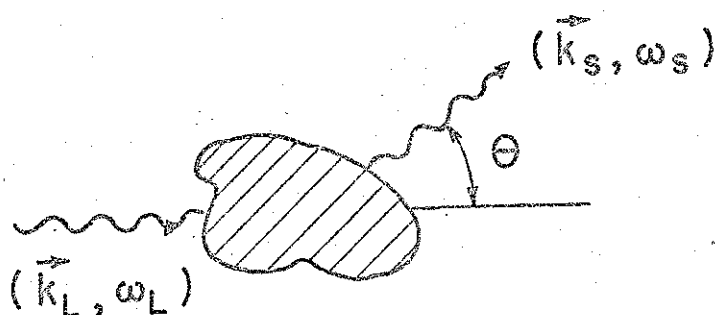


Fig.III-1. Representação esquemática de um processo típico de espalhamento. A região hachureada representa o sistema eletrônico e θ é o ângulo de espalhamento.

A secção eficaz de espalhamento por intervalo de frequência e por intervalo de ângulo sólido, para um processo deste tipo, é dada dentro do formalismo de Van Hove^(2,4) por

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega_s d\Omega} = \gamma \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i(\omega_s - \omega_L)t} \langle \tau^+(0) \tau(t) \rangle, \quad (3)$$

onde os parênteses angulares indicam a média estatística a temperatura de T. τ é o operador de espalhamento escrito como :

$$\tau(t) = \sum_{\alpha\alpha'} \int d^3r [v(\vec{r}) P_{\alpha\alpha'}^{(1)}(\vec{r}, \vec{r}', t)] \quad \vec{r} = \vec{r}' \quad (4)$$

onde $v(\vec{r})$ obedece a equação (5)

$$v(\vec{r}) = v(\vec{r}) + v(\vec{r}) [E - H_0]^{-1} v(\vec{r}) \quad (5)$$

sendo E a energia do estado inicial, H_0 a hamiltoniana não perturbada,

$$v(\vec{r}) = - \frac{1}{c} \vec{A}(\vec{r}, 0) \cdot \vec{J}(\vec{r}, 0) \quad (6)$$

$R_{\alpha\alpha'}^{(1)}(\vec{r}\vec{r}',t)$ a matriz densidade a uma partícula, definida na equação (8-II) e $\gamma = v_0^2 \omega_s^2 / (2\pi)^3 c^4$ sendo v_0 o volume de espalhamento.

Usando (4) a secção de espalhamento será reescrita como :

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega_s d\Omega} = \gamma \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \int d^3r d^3r_2 [v^+(\vec{r}_1) v(\vec{r}_3) \times \sum_{\alpha\alpha'} \sum_{\beta\beta'} < R_{\alpha\alpha'}^{(1)}(\vec{r}_1 \vec{r}_2, 0) R_{\beta\beta'}^{(1)}(\vec{r}_3, \vec{r}_4, t) >]$$

$$\begin{aligned} \vec{r}_1 &= \vec{r}_2 \\ \vec{r}_3 &= \vec{r}_4 \end{aligned} \quad (7)$$

Definindo agora a susceptibilidade generalizada pela equação (6)

$$\chi_{\alpha\alpha'}^{\beta\beta'}(\vec{r}, \vec{r}', t) = i \frac{\Theta(t)}{2} < [R_{\alpha\alpha'}^{(1)}(\vec{r}, 0), R_{\beta\beta'}^{(1)}(\vec{r}', t)] > \quad (8)$$

(sendo $\Theta(t)$ a função de Heaviside), pode-se mostrar que a parte imaginária de sua transformada de Fourier satisfaz a relação :

$$\chi_{\alpha\alpha'\beta\beta'}^{\prime\prime}(\vec{r}\vec{r}', \omega) = \frac{1}{2} (n_\omega + 1)^{-1} S_{\alpha\alpha'}^{\beta\beta'}(\vec{r}\vec{r}', \omega) \quad (9)$$

onde $S_{\alpha\alpha'}^{\beta\beta'}(\vec{r}\vec{r}', \omega)$ é a transformada de Fourier de

$$S_{\alpha\alpha'}^{\beta\beta'}(\vec{r}\vec{r'};t) = \langle R_{\alpha\alpha'}^{(1)}(\vec{r'},0) R_{\beta\beta'}^{(1)}(\vec{r'},t) \rangle, \quad (10)$$

e n_ω é a função de distribuição de Bose-Einstein.

A equação (9) é uma das formas do teorema de flutuação-dissipação (7-9)

A secção de espalhamento pode então ser relacionada com a parte imaginária da susceptibilidade generalizada, pela equação

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma}{d\omega_s d\Omega} &= \gamma(n_\omega + 1) \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \sum_{\alpha\alpha'} \sum_{\beta\beta'} \int \int d^3r_1 d^3r_2 \left[v^+(\vec{r}_1) \right. \\ &\times v(\vec{r}_3) \chi_{\alpha\alpha'}^{\beta\beta'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \vec{r}_4; \omega) \left. \right] \\ &\quad \vec{r}_1 = \vec{r}_2 \\ &\quad \vec{r}_3 = \vec{r}_4 \end{aligned} \quad (11)$$

ou

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega_s d\Omega} = \gamma(n_\omega + 1) \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \sum_{\alpha\alpha'} \int d^3r \left[v(\vec{r}) R_{1\alpha\alpha'}^{(1)\dagger}(\vec{r}\vec{r'};\omega) \right]_{\vec{r}' = \vec{r}} \quad (12)$$

onde introduzimos

$$R_{1\alpha\alpha'}^{(1)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \omega) = \sum_{\beta\beta'} \int d^3r_3 [V(\vec{r}_3) \chi_{\alpha\alpha'}^{\beta\beta'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \vec{r}_4, \omega)] \quad (13)$$

$\vec{r}_4 = \vec{r}_3$

que nada mais é do que a convolução da perturbação externa com a susceptibilidade generalizada, portanto a resposta do sistema à perturbação externa, isto é a flutuação na densidade induzida pelo potencial externo.

Neste ponto vamos fazer contato com o capítulo anterior supondo que o sistema eletrônico seja descrito por uma hamiltoniana de quase-partícula, $\epsilon(\vec{r}, \sigma)$, e identificando $R_1^{(1)}$, definido pela equação (13), com a flutuação no operador densidade a uma quase-partícula, induzida pela potencial espalhador, a qual satisfaz a equação (23-II).

Como estamos interessados em situações que envolvem um campo magnético uniforme e constante, \vec{B}_0 , introduzimos a representação definida pela equação (25-II). O operador densidade toma a forma

$$\rho_1(\vec{r}\alpha\vec{r}'\alpha') = e^{-iA(\vec{r}\vec{r}')} \sum_{\vec{k}\vec{k}'} \{ \vec{k}\alpha | \rho_1 | \vec{k}'\alpha' \} \phi_{\vec{k}\alpha}(\vec{r}) \phi_{\vec{k}'\alpha'}^*(\vec{r}')$$

que substituída na equação (12) e integrando em \vec{r} resulta em

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega_s d\Omega} = \gamma(n_\omega + 1) \frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{\vec{k}_\alpha \vec{k}'_\alpha} \{ \vec{k}'_\alpha | V | \vec{k}_\alpha \} \{ \vec{k}_\alpha | \rho_1^+ | \vec{k}'_\alpha \} \quad (14)$$

Nesta equação $\{ \vec{k}_\alpha | \rho_1 | \vec{k}'_\alpha \}$ obedece a equação de transporte generalizada deduzida no Capítulo II (equação (43) ou (45)) tendo $V(\vec{r}, t)$ como o potencial impulsionador.

Em conclusão, podemos dizer que o método do campo auto-consistente generalizado permite uma conveniente descrição unificada do espalhamento da luz por um sistema de muitos fermions.

Aplicação do presente formalismo ao estudo do espalhamento Raman pelo gás de eletrons de condução em semicondutores será o objetivo dos capítulos seguintes.

ESPALHAMENTO DA LUZ POR PLASMA DE ESTADO SÓLIDO

1. Introdução

Um plasma é um conjunto de partículas carregadas interagindo entre si via forças coulombianas e em situação de neutralidade de carga. Plasma de estado sólido é uma frase usada para descrever o conjunto de portadores itinerantes em um sólido.

No que segue estaremos interessados por plasmas em semicondutores, bastante diluído em relação aos metálicos, mas de grande interesse pela flexibilidade na variação das suas características e conseqüente riqueza de informações que pode ser obtida, como comentamos inicialmente no Capítulo I.

As primeiras observações de espalhamento de luz por plasma de estado sólido datam de 1966⁽¹⁾ e desde então este tem sido um campo ativo de pesquisa tanto teórico quanto experimental.⁽²⁻⁶⁾

Uma discussão bastante elucidativa sobre o problema foi dada por Wolff⁽²⁾, bem como a discussão de aspectos novos relacionados com a dinâmica mais complicada de elétrons em cristais.^(2,3)

O gas de elétrons não degenerado apresenta também um interesse especial adicional porque o espectro Raman pode ser

utilizado como uma ferramenta para estudar a função de distribuição de velocidades dos portadores em condição de não equilíbrio.⁽³⁾

A primeira experiência é devida a Mooradian⁽⁵⁾ que utilizou campos elétricos intensos para excitar os eletrons, e mais recentemente, uma outra técnica, baseada na absorção de dois fons para induzir a distribuição de excitações não-equilibradas foi usada, com sucesso em nossos laboratórios.⁽⁶⁾

2. A Secção de Espalhamento

Se nenhum campo magnético uniforme e constante está presente, isto é, quando $\vec{B}_0 = 0$, a representação definida pela equação (25 - II) torna-se o próprio elemento de matriz do operador \hat{O} entre estados de Bloch. A secção de espalhamento, dada na equação (14 - III) toma a seguinte forma :

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \gamma (n_\omega + 1) \frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{\vec{k}\alpha\vec{k}'\alpha'} \langle \vec{k}'\alpha' | V | \vec{k}\alpha \rangle \langle \vec{k}\alpha | \rho_1^+ | \vec{k}'\alpha' \rangle \quad (1)$$

e $\langle \vec{k}\alpha | \rho_1 | \vec{k}'\alpha' \rangle$ obedece a equação (43-II) com $\vec{B}_0 = 0$.

A equação (1) nos mostra que o espalhamento tanto pode ser produzido por flutuações na densidade de carga ($\alpha = \alpha'$) como por flutuações na densidade de spin ($\alpha = -\alpha'$). Analizaremos, neste capítulo, ambos os casos.

3. Espalhamento por Flutuações na Densidade de Carga

3.a. A Energia de Interação

A interação do sistema de muitos eletrons com a radiação externa é dada pela hamiltoniana escrita na eq. (III-1).

Impondo que a frequência da radiação incidente seja menor do que o gap entre as bandas, o sistema de eletrons de condução pode ser descrito por uma hamiltoniana de massa efetiva, $H(\vec{k})$ apropriada a simetria do cristal.⁽⁷⁾

Dentro deste esquema, a interação com a radiação é tratada substituindo-se em $H(\vec{k})$, \vec{k} por $\vec{k} + \frac{e}{c} \vec{A}$ com $\vec{k} = -i\nabla$.

Expandindo-se $H(\vec{k} + \frac{e}{c} \vec{A})$ em potências de A , obtém-se

$$H(\vec{k} + \frac{e}{c} \vec{A}) = H(\vec{k}) + \frac{e}{c} \vec{A} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{k}} + \frac{e}{c} \frac{\partial H}{\partial \vec{k}} \cdot \vec{A} + \frac{e^2}{c^2} \vec{A} \cdot \frac{\partial^2 H}{\partial \vec{k}^2} \cdot \vec{A} + \dots \quad (2)$$

Então, dentro da aproximação de massa efetiva, a hamiltoniana de interação de um quase-elétron com a radiação, é dada por

$$V = \frac{e}{c} \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{k}} + \frac{e^2}{2c^2} \vec{A} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \vec{k}^2} \cdot \vec{A} + \dots \quad (3)$$

A equação (3) é válida para cada elétron da banda que estamos considerando. Somando sobre todos os elétrons e definindo um operador densidade de corrente, na aproximação de massa efetiva⁽⁸⁾, por

$$J = -\frac{e}{2} \sum_j \left[\frac{\partial H}{\partial \vec{k}} \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) + \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) \frac{\partial H}{\partial \vec{k}} \right] \\ - \frac{e^2}{2c} \sum_j \frac{\partial^2 H}{\partial \vec{k}^2} \vec{A}(\vec{r}) \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) + \dots$$

a interação ainda pode ser escrita na forma dada pela equação (III - 1).

Para semicondutores, cujos elétrons de condução, podem ser descritos por uma hamiltoniana com dispersão parabólica, $H(\vec{k}) = k^2/2m^*$, (m^* é a massa efetiva dos elétrons de condução) a interação com a radiação será dada por

$$V = \frac{e}{m c} (\vec{A} \cdot \vec{k} + \vec{k} \cdot \vec{A}) + \frac{e^2}{m c^2} A^2. \quad (4)$$

Da equação (4) vemos que temos dois tipos de acoplamento eletron-foton: termos lineares, da forma $\vec{k} \cdot \vec{A}$ e termos quadráticos, da forma A^2 . Como o espalhamento da luz é um processo a dois ftons, os dois primeiros somente contribuem em segunda ordem e o último tem uma contribuição em primeira ordem. Graficamente estes processos são convenientemente visualizados na figura (IV - 1).

Para processos de espalhamento longe da ressonância, pode-se mostrar que a soma das duas primeiras parcelas dá uma contribuição

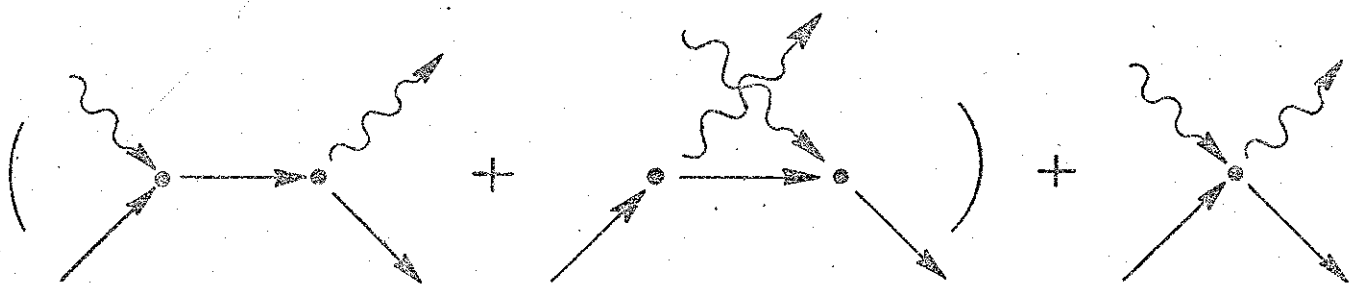


Fig.IV-1. Diagramas representativos das três possíveis contribuições para o espalhamento da luz.

tribuição desprezível⁽⁹⁾ portanto o último termo da equação (4) será dominante.

Escrevendo o potencial vetor da radiação como

$$\hat{A}(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}\mu} \left[\frac{2\pi c^2}{v_\infty \omega_{\vec{k}\mu}} \right]^{1/2} \vec{e}_{\vec{k}\mu} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega_{\vec{k}\mu} t)} + \text{c.c.} \quad (5)$$

onde \vec{k} é o vetor de onda, μ o índice de polarização, \vec{e} o vetor unitário de polarização, v_∞ o volume e ϵ_∞ a constante dielétrica do meio, obtem-se para o potencial de espalhamento

$$\langle \vec{k}' \alpha' | V | \vec{k} \alpha \rangle = 2\pi \delta_{\vec{k}', \vec{k} + \vec{q}} \delta_{\alpha\alpha'} (e^2/mc^2) (\vec{e}_L \cdot \vec{e}_S) (c^2/v_\infty \omega_L \omega_S \epsilon_\infty) \quad (6)$$

onde \vec{q} é o momento transferido ao sistema no processo de espalhamento.

3.b. A Flutuação na Densidade de Carga

Na ausência do campo magnético \vec{B}_0 a equação (43 - II) torna-se

$$\begin{aligned} & \left[i \frac{\partial}{\partial t} - \epsilon(\vec{k}) + \epsilon(\vec{k}') \right] \langle \vec{k} | \rho_1 | \vec{k}' \rangle + \\ & + (n_{\vec{k}} - n_{\vec{k}'}) \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} \langle \vec{k}, \vec{p} | V_c | \vec{k}', \vec{p}' \rangle \langle \vec{p}' | \rho_1 | \vec{p} \rangle \\ & = (n_{\vec{k}'} - n_{\vec{k}}) \langle \vec{k} | V | \vec{k}' \rangle + J_{\text{col}} \{ \rho \}, \quad (7) \end{aligned}$$

onde negligenciamos o índice de spin.

Para $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{q}$ e ρ_1 variando temporalmente como $e^{-i\omega t}$, onde ω é frequência do potencial impulsor, a equação (7) para um sistema de fermions não interagindo reduz-se a

$$[\omega - \epsilon(\vec{k}) + \epsilon(\vec{k} + \vec{q})] \rho_1(\vec{k}, \vec{q}) = (n_{\vec{k} + \vec{q}} - n_{\vec{k}}) V(\vec{k}', \vec{q}), \quad (8)$$

e então

$$\langle \vec{k} + \vec{q} | \rho_1 | \vec{k} \rangle = \rho_1(\vec{k}, \vec{q}) = F(\vec{k}, \vec{q}; \omega) V(\vec{k}, \vec{q}) \quad (9)$$

sendo

$$F(\vec{k}, \vec{q}; \omega) = [n_{\vec{k} + \vec{q}} - n_{\vec{k}}] [\epsilon_{\vec{k} + \vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}} + \omega]^{-1} \quad (10)$$

Escrevendo explicitamente a interação coulombiana, a equação (7) torna-se

$$\begin{aligned} & [\omega - \epsilon(\vec{k}) + \epsilon(\vec{k} + \vec{q})] \rho_1(\vec{k}, \vec{q}) \\ &= (n_{\vec{k} + \vec{q}} - n_{\vec{k}}) \frac{4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} \sum_{\vec{k}'} \rho_1(\vec{k}', \vec{q}) \\ &= [n_{\vec{k} + \vec{q}} - n_{\vec{k}}] V(\vec{k}, \vec{q}), \end{aligned} \quad (11)$$

onde ϵ_0 é a constante dielétrica estática.

Tanto na equação (11) quanto na equação (8) absorvemos em ω , na aproximação do tempo de relaxação de Boltzmann ⁽¹⁰⁾, possíveis mecanismos de colisão.

A equação (11) pode ser resolvida facilmente de modo a obter

$$\rho_1(\vec{k}, \vec{q}) = \langle \vec{k} + \vec{q} | V | \vec{k} \rangle F(\vec{k}, \vec{q}; \omega) + \frac{4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} F(\vec{k}, \vec{q}, \omega) \left[1 + \frac{4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} F(\vec{q}, \omega) \right]^{-1} \sum_{\vec{k}', \alpha} \langle \vec{k}' + \vec{q} | V | \vec{k}' \rangle F(\vec{k}', \vec{q}; \omega) \quad (12)$$

sendo $F(\vec{q}, \omega)$ dada por

$$F(\vec{q}, \omega) = \sum_{\vec{k}\alpha} F(\vec{k}', \vec{q}; \omega) \quad (13)$$

3.c. Cálculo da Secção de Espalhamento

Para o gas de eletrons não interagindo, substituindo-se o resultado (9) na equação (1), obtem-se para a secção de espalhamento

$$\left[\frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega} \right]_0 = \gamma(n_\omega + 1) \frac{\text{Im}}{\pi} \sum_{\vec{k}\alpha} F(\vec{k}, \vec{q}; \omega) |\langle \vec{k} | V | \vec{k} + \vec{q} \rangle|^2,$$

que com o potencial de espalhamento dado na equação (6), torna-se

$$\left[\frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega} \right]_0 = (e^2/m^*c^2\epsilon_\infty)^2 (\vec{e}_L \cdot \vec{e}_S)^2 \frac{\omega_S}{\omega_L} (n_\omega + 1) \text{Im} \sum_{\vec{k}\alpha} F(\vec{k}, \vec{q}; \omega). \quad (14)$$

A secção de espalhamento para o gás interagindo é calculada substituindo-se o resultado (12) na equação (1), obtendo-se

$$\left\{ \frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega} \right\}_c = \gamma(n_\omega + 1) \frac{\text{Im}}{\pi} \left\{ \sum_{\vec{k}\alpha} F(\vec{k}, \vec{q}) \left| \langle \vec{k} | V | \vec{k} + \vec{q} \rangle \right|^2 + \right. \\ \left. + \frac{4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} \frac{\sum_{\vec{k}\alpha} F^*(\vec{k}, \vec{q}) V(\vec{k}, \vec{q}) \sum_{\vec{k}'\alpha'} F(\vec{k}', \vec{q}) V^*(\vec{k}', \vec{q})}{1 - \frac{4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} F(\vec{q}, \omega)} \right\} \quad (15)$$

Para o potencial de espalhamento dado na equação (6), a equação (15) torna-se

$$\left\{ \frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} \right\}_c = (e^2/m^*c^2\epsilon_\infty)^2 (\vec{e}_L \cdot \vec{e}_S)^2 \frac{\omega_S}{\omega_L} (n_\omega + 1) \cdot \\ \cdot |\epsilon(\vec{q}, \omega)|^{-2} \text{Im} \sum_{\vec{k}\alpha} F(\vec{k}, \vec{q}; \omega) = \\ = (d^2\sigma/d\Omega d\omega)_c^{(0)} / |\epsilon(\vec{q}, \omega)|^2 \quad (16)$$

onde

$$\epsilon(\vec{q}, \omega) = 1 - (4\pi e^2/q^2 \epsilon_0) \sum_{\vec{k}\alpha} F(\vec{k}, \vec{q}; \omega) \quad (17)$$

é a constante dielétrica do gás de elétrons na aproximação de Hartree-Fock dependente do tempo.^(11,12) Vemos, da equação (16), que o efeito da interação coulombiana é reduzir a secção de espalhamento pelo fator $|\epsilon(\vec{q}, \omega)|^2$.

Para obtermos a expressão para a secção de espalhamento precisamos calcular a função $F(\vec{q}, \omega)$.

Desprezando quaisquer efeitos de relaxação que levem a um tempo de vida finito para as excitações criadas no sistema, substituindo a equação (10) na equação (13) e escrevendo

$$F = F' + i F''$$

obtemos

$$F'(\vec{q}, \omega) = vp \sum_{\vec{k}\alpha} \frac{n(\vec{k}+\vec{q}) - n(\vec{k})}{\epsilon(\vec{k}+\vec{q}) - \epsilon(\vec{k}) + \omega} \quad (18)$$

e

$$F''(\vec{q}, \omega) = \pi \sum_{\vec{k}\alpha} [n(\vec{k}+\vec{q}) - n(\vec{k})] \delta[\epsilon(\vec{k}+\vec{q}) - \epsilon(\vec{k}) + \omega] \quad (19)$$

onde vp representa valor principal da integral.

Introduzindo as variáveis definidas pela equação (47-II)

e passando a soma em \vec{k} para uma integração em coordenadas esféricas (k, θ, ϕ)

obtemos, para as equações (18) e (19), depois de integrar na parte angular e somar sobre os spins

$$F'(\vec{q}, \omega) = \frac{V_0}{\pi^2} \int_0^\infty \frac{\partial n}{\partial \epsilon} k^2 dk - \frac{V_0}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \frac{m^* \omega}{q} \ln \left| \frac{\omega + (kq/m^*)}{\omega - (kq/m^*)} \right| k dk \quad (20)$$

e

$$F''(\vec{q}, \omega) = \frac{V_0}{2\pi} \frac{m^{*2} \omega}{q} \int_{\frac{m^* \omega^2}{2q^2}}^\infty \frac{\partial n}{\partial \epsilon} d\epsilon \quad (21)$$

Substituindo os resultados (20) e (21) na equação (16) podemos obter a secção de espalhamento para o gás de eletrons em qualquer temperatura. Estudaremos a seguir os limites $T = 0^{\circ}k$ e o gás não degenerado ($T \gg T_F$, sendo T_F a temperatura de Fermi).

3.d. O Gás Degenerado em $T = 0^{\circ}k$

Para temperaturas muito baixas ($T \ll T_F$), temos $\frac{\partial n}{\partial \epsilon} \approx \delta(\epsilon - \epsilon_F)$, sendo ϵ_F a energia de Fermi, e as integrais (20) e (21) resultam em

$$F'(\vec{q}, \omega) = -g_0 \left[\frac{\omega}{qv_F} \ln \left| \frac{(\omega/qv_F) + 1}{(\omega/qv_F) - 1} \right| - 2 \right] \quad (22)$$

e

$$F''(\vec{q}, \omega) = \frac{\pi}{2} g_0 \frac{|\omega|}{qv_F} \theta\left(1 - \frac{\omega}{qv_F}\right), \quad (23)$$

onde g_0 é a densidade de estados no nível Fermi e $\theta(x)$ a função de Heaviside.

Com as equações (22) e (23) obtemos para o inverso do fator de blindagem (quadrado do módulo da constante dielétrica) a expressão

$$|\epsilon(\vec{q}, \omega)|^2 = \left[1 - \frac{4\pi e^2}{q^2 \epsilon_0} g_0 \left\{ \frac{\omega}{qv_F} \ln \left| \frac{\left(\frac{\omega}{qv_F}\right) + 1}{\left(\frac{\omega}{qv_F}\right) - 1} \right| - 2 \right\} \right]^2 +$$

$$+ \left[\frac{2\pi^2 e^2}{\epsilon_0 q^2} g_0 \frac{\omega}{qv_F} \theta\left(1 - \frac{\omega}{qv_F}\right) \right]^2, \quad (24)$$

onde v_F é a velocidade de Fermi.

A presença da função degrau na equação (23) nos mostra que a secção de espalhamento se anula na região $\omega > qv_F$, a não ser para os valores de ω , soluções da equação $\text{Re } \epsilon(\vec{q}, \omega) = 0$, que nos dão os modos coletivos do sistema. Expandindo para $\omega/qv_F \gg 1$, o logaritmo na equação (24) determinamos a relação de dispersão destas oscilações coletivas como

$$\omega^2 = \omega_p^2 + \frac{3}{5} q^2 v_F^2,$$

onde $\omega_p = \left[\frac{4\pi n e^2}{m^* \epsilon_0} \right]^{1/2}$ é a frequência de plasma do sistema.

Um gráfico típico da secção de espalhamento está desenhado na figura (IV - 2), para dois valores da concentração eletrônica ($n = 2 \times 10^{15}/\text{cm}^3$ e $n = 1.7 \times 10^{17}/\text{cm}^3$). A linha tracejada corresponde à secção de espalhamento para o gás não interagindo (observe-se o fator de escala). Como consequência da blindagem, o espalhamento por quase-partículas individuais, praticamente desaparece.

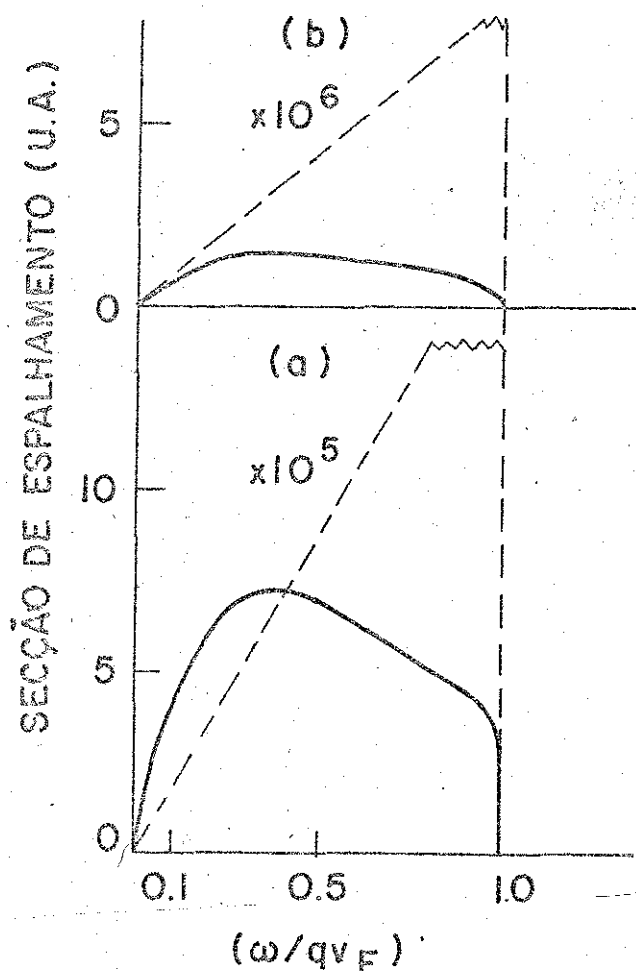


Fig. IV-2. Secção de espalhamento por flutuações na densidade de carga, para $T=0^0\text{K}$ e $q=10^4\text{cm}^{-1}$. A figura (a) corresponde a concentração $n = 2 \times 10^{15}\text{el/cm}^3$ e a figura (b) a concentração $n = 1.7 \times 10^{17}\text{el/cm}^3$.

3.e. O Gas não Degenerado

No limite de altas temperaturas ($T \gg T_F$) a função de Fermi-Dirac tende a distribuição de Maxwell

$$n(\epsilon) = \frac{4\pi^3 n \hbar^3}{(2\pi m^* k_B T)^{3/2}} e^{-\beta\epsilon} \quad (25)$$

com $\beta = 1/k_B T$, k_B a constante de Boltzmann e T a temperatura do sistema. A análise, neste caso, é mais elaborada do que aquela feita para o gas degenerado porque as integrais que determinam $F(\vec{q}, \omega)$ resultam em funções transcendentais, pois com a expressão (25) as equações (20) e (21) tornam-se

$$(1/v_0) F'(\vec{q}, \omega) = -\beta n + (2/\sqrt{\pi}) \beta n \xi^3 I, \quad (26)$$

$$(1/v_0) F''(\vec{q}, \omega) = n (2\pi)^{1/2} \beta \xi e^{-\xi^2} \quad (27)$$

onde $\xi = \omega/q v_t$, sendo v_t a velocidade térmica dos elétrons, definida por $v_t^2 = 2k_B T_e / m^*$ (T_e é a temperatura efetiva do sistema eletrônico) e I a integral

$$I = \int_0^\infty dx x \exp(-\xi^2 x^2) \cdot \ln |(x+1)/(x-1)|. \quad (28)$$

A integral I, pode, depois de algumas manipulações matemáticas (desenvolvidas no Apêndice C) ser escrita como :

$$I = \frac{\sqrt{\pi}}{\xi^2} D(\xi) , \quad (28-a)$$

onde

$$D(\xi) = e^{-\xi^2} \int_0^\xi e^{x^2} dx \quad (28-b)$$

é a chamada integral de Dawson⁽¹³⁾

Substituindo-se os resultados (26) e (27) nas equações (14) e (16) obtem-se a secção de espalhamento do gas de eletrons não interagindo como

$$\left[\frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega} \right]_0 = r_0^2 (\vec{e}_L \cdot \vec{e}_S)^2 \frac{\omega_S}{\omega_L} \frac{1}{qv_t} e^{-\omega^2/q^2 v_t^2} \quad (29)$$

e para o denominador de blindagem

$$\begin{aligned} |\epsilon|^{-2} = & \left[1 + \frac{4\pi n e^2}{\epsilon_0 q^2} \beta \left(1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \xi^3 I \right) \right]^2 \\ & + \left[\frac{4\pi n e^2}{\epsilon_0 q^2} \beta \sqrt{2\pi} \xi \bar{e} \xi^2 \right]^2 . \end{aligned} \quad (30)$$

Para pequenos valores de q (isto é $q \ll q_D$, sendo q_D^{-1} o chamado comprimento de Debye⁽¹⁴⁾), o sistema apresenta uma exci

tação coletiva bem definida cuja relação de dispersão pode ser obtida através de um procedimento análogo aquele desenvolvido para o gas degenerado, resultando em

$$\omega^2 = \omega_p^2 + \frac{3}{2} q^2 v_t^2 \quad (31)$$

Na figura IV-3 mostra-se um gráfico típico da secção de espalhamento do gás de eletrons não-degenerado para concentrações de 2×10^{15} el/cm³ e 1.7×10^{17} el/cm³. A curva tracejada (gaussiana) corresponde ao espalhamento pelo gás não interagindo.

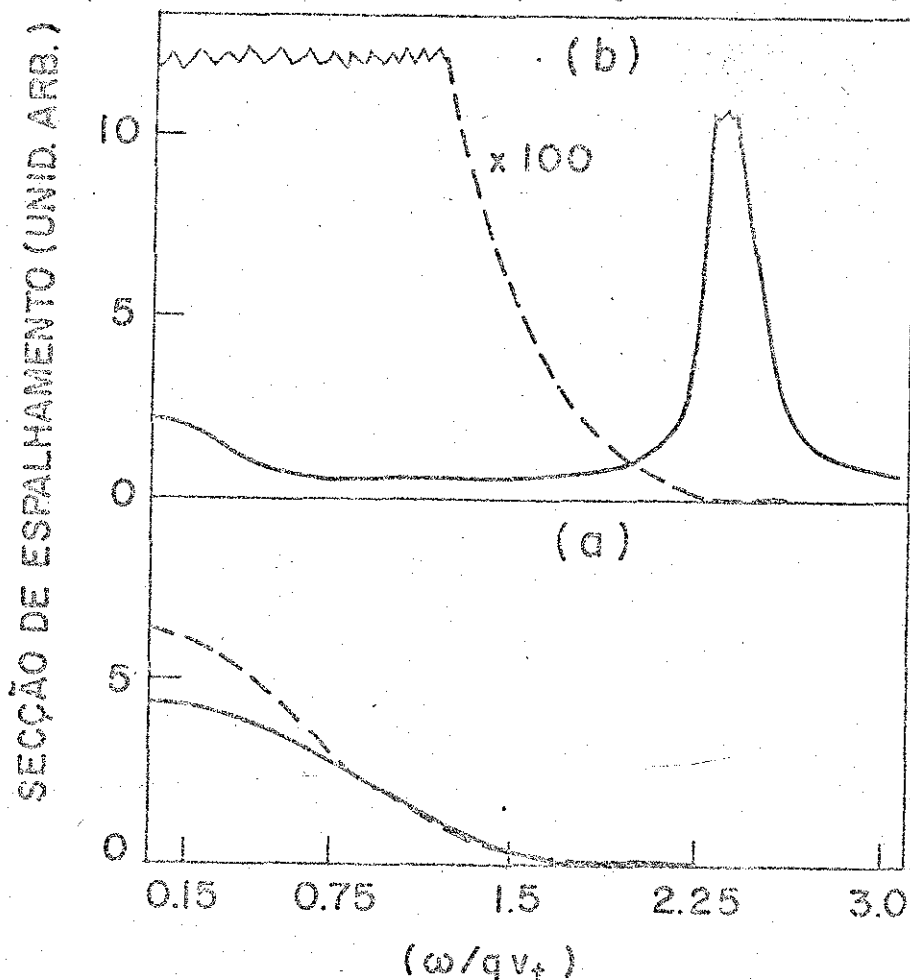


Fig.IV-3: Secção de espalhamento para um gas não degenerado. A figura (a) corresponde a concentração de $n = 2 \times 10^{15}/\text{cm}^3$, $T = 290^\circ\text{K}$. A figura (b) corresponde a $n = 1.7 \times 10^{17}/\text{cm}^3$, $T = 400^\circ\text{K}$.

Para concentrações baixas (fig.IV-3-a) observam-se pequenos desvios do perfil gaussiano devido a interação coulombiana.

Aumentando-se a concentração, o efeito de blindagem torna-se bastante acentuado e o espalhamento por partículas individuais praticamente desaparece.

4. Espalhamento por Flutuações na Densidade de Spin

4.a. A Energia de Interação

Quando a radiação interage com o sistema eletrônico, a densidade de carga é modificada dando origem aos processos de espalhamento estudados na secção anterior.

Um outro aspecto a ser levado em consideração corresponde ao acoplamento da radiação com a distribuição de spins do sistema via interação spin-órbita.⁽¹⁵⁾

A hamiltoniana do sistema eletrônico é dada ainda pela equação (III-1) incluindo-se em P_j o efeito spin-órbita⁽¹⁶⁾, isto é, definindo

$$\vec{p}_j = \vec{p}_j + \frac{1}{4mc^2} \vec{\sigma}_j \times \nabla_j V_L(\vec{r}_j) \quad , \quad (32)$$

onde $V_L(P)$ é o potencial cristalino.

No processo de espalhamento considerado agora, um foton (\vec{k}_L, ω_L), quando espalhado para um estado (\vec{k}_S, ω_S) perturba o movimento eletrônico, criando (ou destruindo) uma flutuação na densidade de spins (de vetor de onda $\vec{q} = \vec{k}_L - \vec{k}_S$ e freqüência $\omega_q = \omega_L - \omega_S$) (Figura IV-4).

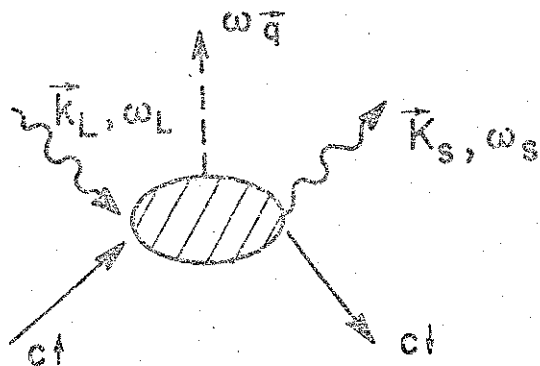


Fig. IV-4. Representação esquemática do processo de espalhamento considerado.

Descreveremos a situação através de um processo de terceira ordem, envolvendo o acoplamento dipolar duas vezes e a interação spin-órbita uma vez (responsável pela mudança de spin). Os diagramas representativos desta aproximação estão desenhados na figura IV-5.

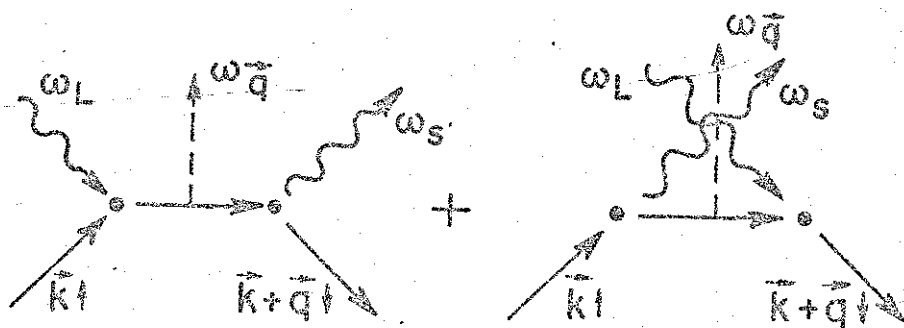


Fig.IV-5. Diagramas representativos da aproximação considerada.

O elemento de matriz do potencial de interação, V, será então, escrito como

$$\begin{aligned} & \langle \vec{k} \uparrow | V | \vec{k} + \vec{q} \uparrow \rangle = \\ & = \frac{\lambda}{2} (e/mc)^2 \sum_{\ell \ell'} \frac{\langle \vec{k} + \vec{q} \uparrow | \vec{A}^S \cdot \vec{p} | \ell' \rangle \langle \ell' | \sigma_- L_+ | \ell \rangle \langle \ell | \vec{A}^L \cdot \vec{p} | \vec{k} \uparrow \rangle}{(\epsilon_{\vec{k} \uparrow} - \epsilon_{\ell'} + \omega_L) (\epsilon_{\vec{k} \uparrow} - \epsilon_{\ell} + \omega_L)} \end{aligned}$$

+ mesmo termo com $\vec{A}_L \leftrightarrow \vec{A}_S$, $\omega_L \rightarrow -\omega_S$. (33)

Na equação (33), $|\vec{k} \alpha\rangle$ representam estados de Bloch na banda de condução, $|\ell\rangle$ e $|\ell'\rangle$ estados de Bloch quaisquer e ϵ as correspondentes energias.. Além disso, escrevemos a interação spin-órbita, inicialmente como $\lambda \vec{L} \cdot \vec{\sigma}$, onde L é o operador momento angular, e por ser mais conveniente ao problema, introduzimos as variáveis cíclicas ($L_{\pm} = L_x \pm i L_y$, $\sigma_{\pm} = \sigma_x \pm i \sigma_y$) e reescrevemos como $(\lambda/2) (L_+ \sigma_- + L_- \sigma_+)$, que resultam nas bandas Stokes e anti-Stokes respectivamente. Por simplicidade, na equação (33), escrevemos apenas o processo Stokes.

4.b. A Flutuação na Densidade de Spin

A equação (45-II) para $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{q}$, $\alpha = \uparrow$, $\alpha' = \downarrow$ e $\vec{B}_0 = 0$, torna-se

$$(\omega - \epsilon_{\vec{k} \uparrow} + \epsilon_{\vec{k} + \vec{q} \downarrow}) \rho_1(\vec{k} \uparrow, \vec{k} + \vec{q} \downarrow)$$

$$= \pi (n_{\vec{k} \uparrow} - n_{\vec{k} + \vec{q} \downarrow}) \sum_{\vec{p} \vec{p}'} \langle \vec{k} \uparrow, \vec{p} \downarrow | V_x | \vec{k} + \vec{q} \downarrow, \vec{p}' \uparrow \rangle \rho_1(\vec{p} \downarrow, \vec{p}' \uparrow) =$$

$$= (n_{\vec{k}+\vec{q}\downarrow} - n_{\vec{k}\uparrow}) \langle \vec{k}\uparrow | V | \vec{k}+\vec{q}\downarrow \rangle + J \cos \{p\}, \quad (34)$$

onde novamente usamos que p_1 varia com o tempo com $e^{i\omega t}$.

Para um sistema isotrópico o elemento de matriz do potencial de troca pode ser expandido em uma série de polinômios de Legendre.⁽¹⁷⁾ Consideraremos apenas o primeiro termo, que designaremos por $\frac{U}{N}$. Isto significa admitir uma interação de contacto no espaço direto $U \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$, que é uma aproximação já bastante usada para o potencial de troca blindado.⁽¹⁸⁻²⁰⁾

Dentro desta mesma aproximação pode-se escrever⁽²⁰⁾

$$\epsilon_{\vec{k}\alpha} = \epsilon_{\vec{k}} - U n_{\alpha} \quad (35)$$

$$\text{onde } n_{\alpha} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}\alpha}$$

Para um sistema paramagnético, sem campo magnético externo, as populações com diferentes orientações de spin são iguais, então

$$\epsilon_{\vec{k}\uparrow} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}\downarrow} = \epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} \quad (36)$$

e

$$n_{\vec{k}\uparrow} - n_{\vec{k}+\vec{q}\downarrow} = n_{\vec{k}} - n_{\vec{k}+\vec{q}}, \quad (37)$$

A equação (34) torna-se

$$\begin{aligned}
 & (\omega - \varepsilon_{\vec{k}} + \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}}) \rho_1(\vec{k} + , \vec{k}+\vec{q} +) + \\
 & + (n_{\vec{k}+\vec{q}} - n_{\vec{k}}) \frac{U}{N} \sum_{\vec{k}'} \rho_1(\vec{k}' + , \vec{k}'+\vec{q} +) \\
 & = (n_{\vec{k}+\vec{q}} - n_{\vec{k}}) < k + |V| \vec{k}+\vec{q} + > ,
 \end{aligned} \tag{38}$$

onde absorvemos em ω os possíveis efeitos de colisão.⁽¹⁰⁾

A equação (38) é formalmente idêntica a equação (11) e pode ser imediatamente resolvida de modo obter

$$\begin{aligned}
 \rho_1(\vec{k}\vec{q}++) &= F(\vec{k},\vec{q},\omega) V(\vec{k},\vec{q}++) \\
 &= \frac{\frac{U}{N} F(\vec{k},\vec{q}) \sum_{\vec{k}'} F(\vec{k}',\vec{q},\omega) V(\vec{k}',\vec{q}++)}{1 + \frac{U}{N} G(\vec{q},\omega)} ,
 \end{aligned} \tag{39}$$

com

$$G(\vec{q},\omega) = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}'} F(\vec{k}',\vec{q},\omega)$$

sendo $F(\vec{k},\vec{q},\omega)$ definido pela equação (10).

O cálculo da função $F(\vec{q}, \omega)$ (e consequentemente de $G(\vec{q}, \omega)$) foi feito na secção 3.

Gráficos típicos da secção de espalhamento para o processo agora considerado são mostrados nas figuras IV-6 e IV-7, para os casos de um gás degenerado e não degenerado respectivamente. Em ambos os casos, a constante U foi arbitrariamente escolhida.

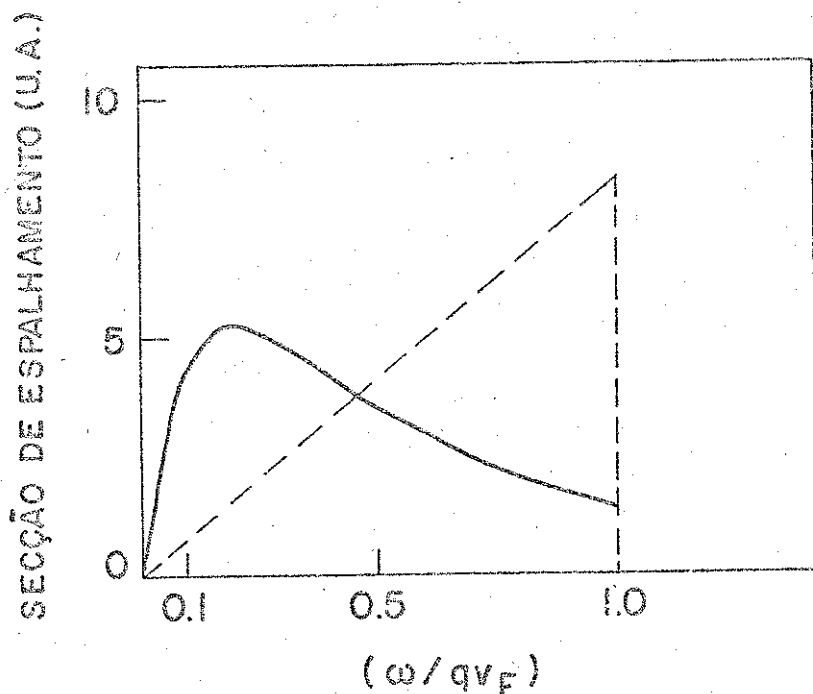


Fig. IV-6. Secção de espalhamento (em unidades arbitrários) por flutuações na densidade de spin, para um gas degenerado ($T = 0^\circ K$) com concentração $n = 1.7 \times 10^7 / \text{cm}^3$ e $U/E_F = 0.8$. Por comparação mostramos o espectro para o gás livre (em linha tracejada).

4.c. A Secção de Espalhamento

Consideremos apenas estados da banda de condução do tipo s, e que a contribuição relevante na soma da equação (33) seja de estados da banda de valência, suposta do tipo p (desprezando possíveis componentes de hibridização)⁽²²⁾

Aproximando os elementos de matriz do potencial de espalhamento por um valor médio constante

$$V = \frac{\lambda}{2} (e/mc)^2 \frac{E_G^2 + \omega_L^2}{(E_G^2 - \omega_L^2)^2} \cdot |\vec{\lambda}_s| |\vec{\lambda}_L| |p_{vc}|^2 \sum_{ij} (e_s^i R_{ij} e_L^j), \quad (40)$$

onde p_{vc} é o elemento de matriz de momento entre estados das bandas de valência e condução no centro da zona, E_G a energia de "gap", $e_{s,L}^i$ são as componentes dos vetores de polarização dos respectivos potenciais vetores do campo de radiação e R_{ij} é o tensor Raman que tem todas as componentes nulas exceto aquelas não diagonais $R_{xz} = R_{zx} = 1$, e $R_{yz} = -R_{zy} = 1$. (esta forma do tensor Raman claramente reflete a conservação do momento angular total no processo de espalhamento) a secção de espalhamento resulta em

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_s} = \left[\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_s} \right]^{(0)} \frac{|\mu(\vec{q}, \omega)|^2}{\omega_s^2} \quad (41)$$

onde

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_s} \right)_s^{(0)} = (n_\omega + 1) V^2 |v|^2 \omega_s^2 / (2\pi)^3 c^4 |\text{Im } G(\vec{q}, \omega)| \quad (42)$$

é a secção de espalhamento para o gás não interagindo e

$$\mu(\vec{q}, \omega) = 1 + (U/N) G(\vec{q}, \omega)$$

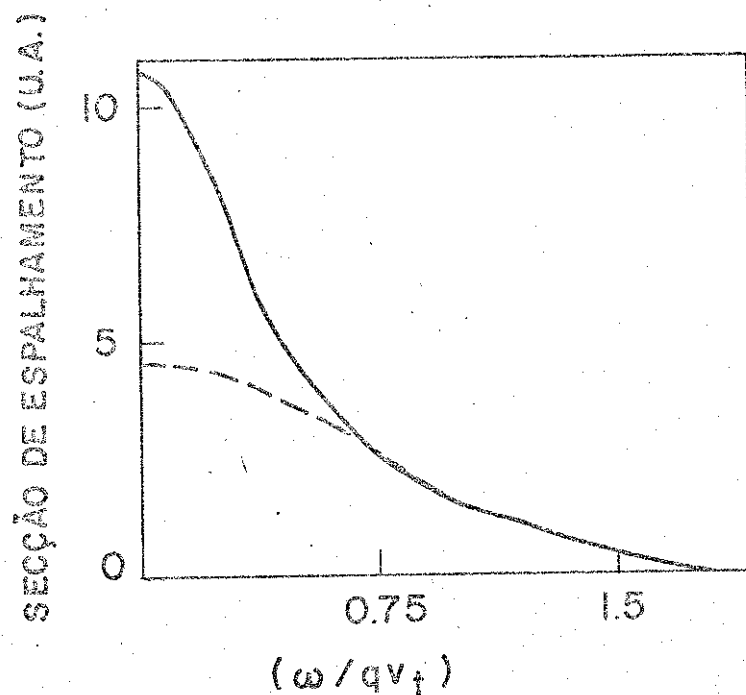


Fig. IV-7. Secção de espalhamento por flutuações na densidade de spin, para um gas não degenerado para $(U/K_B T) = 0.6$

A função $\mu(\vec{q}, \omega)$, cujo módulo ao quadrado aparece no denominador da equação (41), provoca um aumento na secção de espalhamento notadamente no regime de altas temperaturas, como pode ser visto na figura IV-8. Esta função corresponde ao chamado fator de Stoner na teoria de campo molecular do magnetismo.⁽²¹⁾

5. Aplicação para Ga As

As experiências da referência (6) foram realizadas com Ga As, tipo n em uma geometria de espalhamento de 90° .

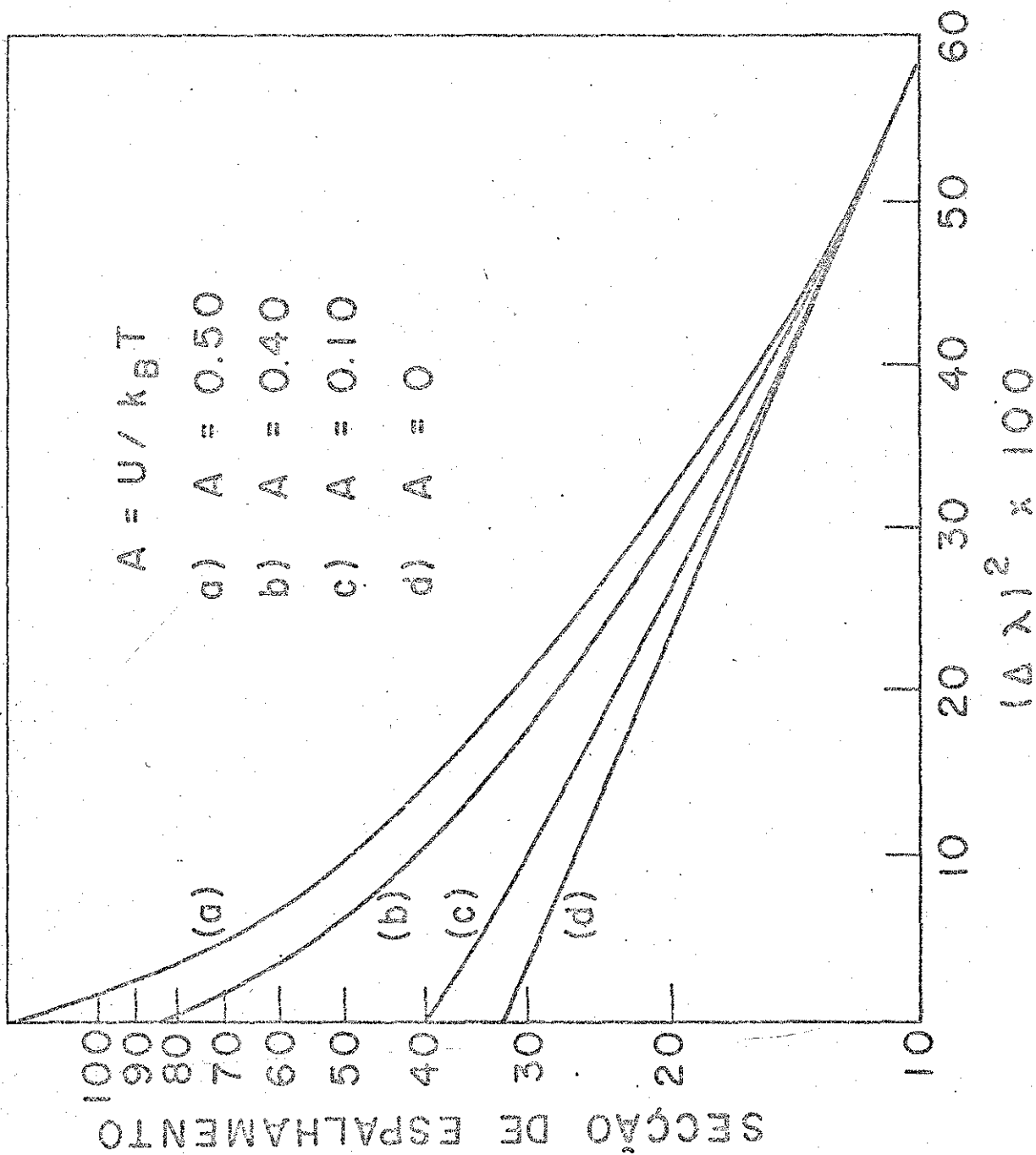


Fig. IV-8. Dependência da seção de espalhamento com o parâmetro U .

A radiação incidente era gerada por um laser de Nd:YAG operando em 1.06μ . Os espectros experimentais observados com forma de linha gaussiana eram compatíveis com uma distribuição maxwelliana de até 560°K , estando o banho térmico a temperatura ambiente.

Nas medidas, para as quais, a relação sinal-ruído era melhor, nítidos desvios da forma gaussiana podiam ser observados notadamente na região de pequenas transferências de energia.

Vamos mostrar agora que os nossos cálculos, baseados nas equações (16) e (41) (que levam em conta efeitos de correlação e potencial de troca) explicam as "anomalias" observadas experimentalmente.

Para as concentrações eletrônicas das amostras estudadas experimentalmente, $n = 2 \times 10^{15}/\text{cm}^3$ e $n = 1.7 \times 10^{17}/\text{cm}^3$, as temperaturas de Fermi são 9.6°K e 183°K respectivamente. Como o banho térmico está a temperatura ambiente o gas de eletrons pode ser suposto não degenerado.

As constantes numéricas foram tomadas como $m^* = 0.07$, $\epsilon_0 = 10$, $q = 2.63 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$.

No trabalho da referência (6), foram realizadas medidas não polarizadas, portanto a intensidade espalhada coletada continha informações de ambas flutuações de densidade : carga e spin.

Entretanto, em baixas concentrações a contribuição para a luz espalhada pela flutuação na densidade de carga é bem maior (da ordem de 30 vezes) do que a flutuação na densidade de

spin⁽⁴⁾, então esta última, pode para esta amostra, ser desprezada. Por outro lado, aumentando-se a densidade de portadores o espalhamento por flutuações na densidade de carga é fortemente blindado e a intensidade medida corresponde quase que inteiramente às flutuações na densidade de spin.

A figura IV-9 mostra a comparação entre nossos cálculos, baseados na equação (16) (expressando o deslocamento de frequências como $|\Delta\lambda|$), para a amostra com $n = 2 \times 10^{15}$ el/cm³ e os resultados de Turtelli et al.⁽⁶⁾ A temperatura determinada pelo ajuste da curva teórica com os dados experimentais foi de 560°K.

A figura IV-10 resulta de cálculos baseados na equação (41) e medidas experimentais para a amostra com $n = 1.7 \times 10^{17}$ el/cm³. O melhor ajuste com os dados experimentais é obtido para uma temperatura de 400°K e um valor de U de 17 meV.

6. Conclusões

O bom acordo entre os resultados teóricos e experimentais mostra o valor da técnica de espalhamento de luz na obtenção de propriedades do "sistema de eletrons quentes metálicos" em um

semicondutor dopado. Reforçamos também a possibilidade de se estabelecer condições de quase-equilíbrio no gas de eletrons quentes com os desvios observados na região de baixa energia explicados como devidos ao efeito da interação no gas de eletrons.

Um outro ponto a ressaltar, é que os desvios da distribuição de Maxwell apareceram, nas amostras estudadas, essencialmente para pequenas transferências de frequências. Das figuras IV-9 e IV-10 notamos que estes desvios são significativos para $(\Delta\lambda)^2 < 6000 \text{ \AA}^2$ e $(\Delta\lambda)^2 < 4500 \text{ \AA}^2$ que correspondem a um valor de $\xi = \omega/qv_t \sim 1$. Isto é, o efeito de muitos corpos é pronunciado para valores da energia transferida, ω , menores que a energia térmica média, qv_t .

Em conclusão, notemos que o sistema de portadores estudado apresenta uma "densidade metálica", com um espaçamento inter-eletrônico $r_s = 1,6$, em unidades de raio de Bohr excitônico (para $n = 1.7 \times 10^{17} \text{ el/cm}^3$). Como foi mostrado por Hedin⁽¹²⁾ é justificável o uso de um potencial de curto alcance para o potencial de troca. Ainda mais, o valor de U que melhor ajusta a curva teórica com os resultados experimentais concorda com o valor calculado por Hedin⁽¹²⁾ para este valor de r_s , embora devamos ressaltar que seus cálculos correspondem ao gas de eletrons metálico a 0°K .

Medidas com uma amostra de Ga As puro vem sendo realizada pelo mesmo grupo.⁽²³⁾ As medidas indicam uma variação da concentração de eletrons foto-excitados com a potência incidente. A comparação com nossos resultados teóricos permitirá a determinação da concentração para cada valor da potência incidente. Este será o objetivo de um trabalho posterior.

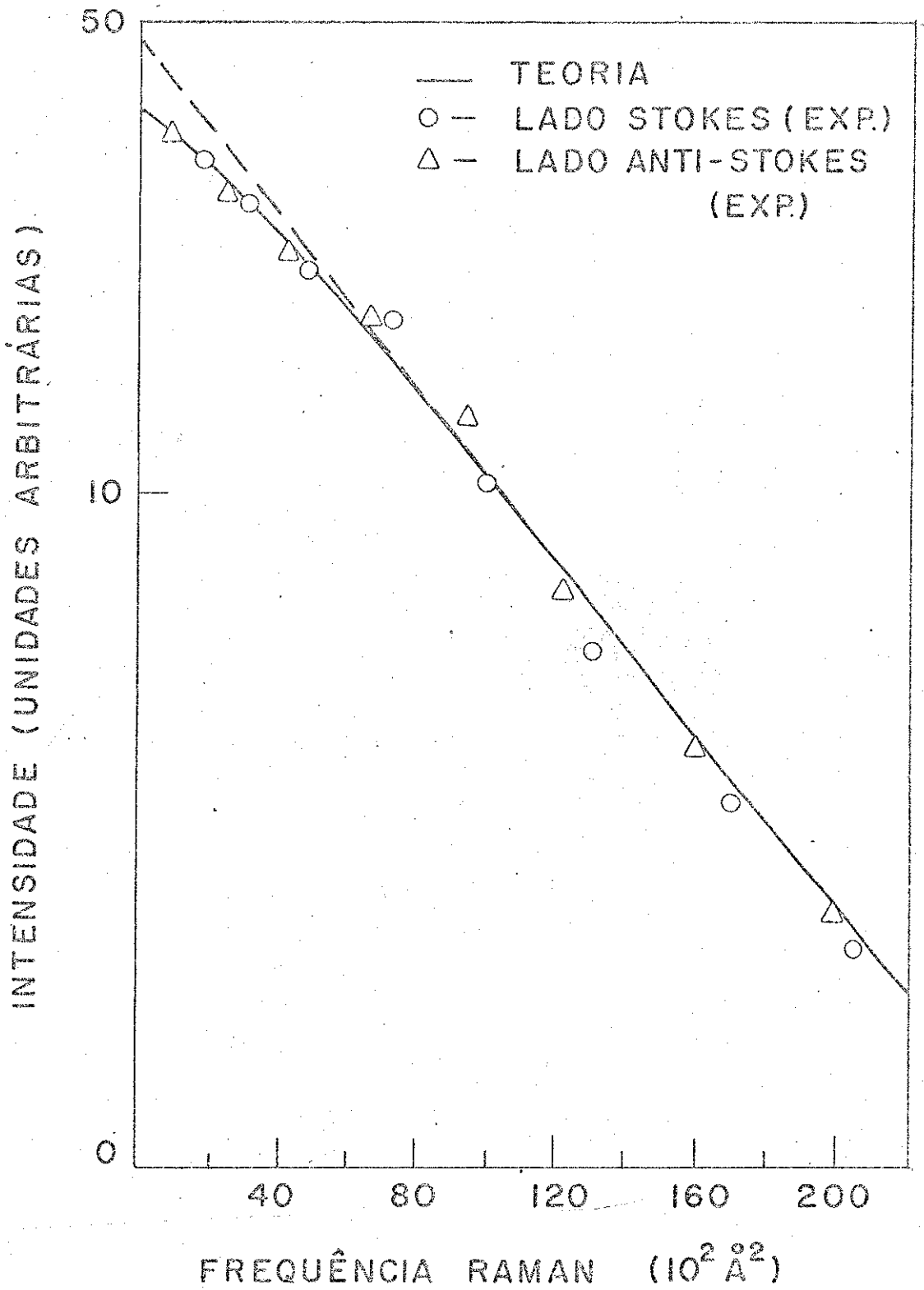


Fig.IV-9. Espectro de espalhamento por quase-partículas individuais para uma amostra de Ga As, com $n = 2 \times 10^{15} \text{ el/cm}^3$. A linha tracejada corresponde ao perfil maxwelliano extrapolado.

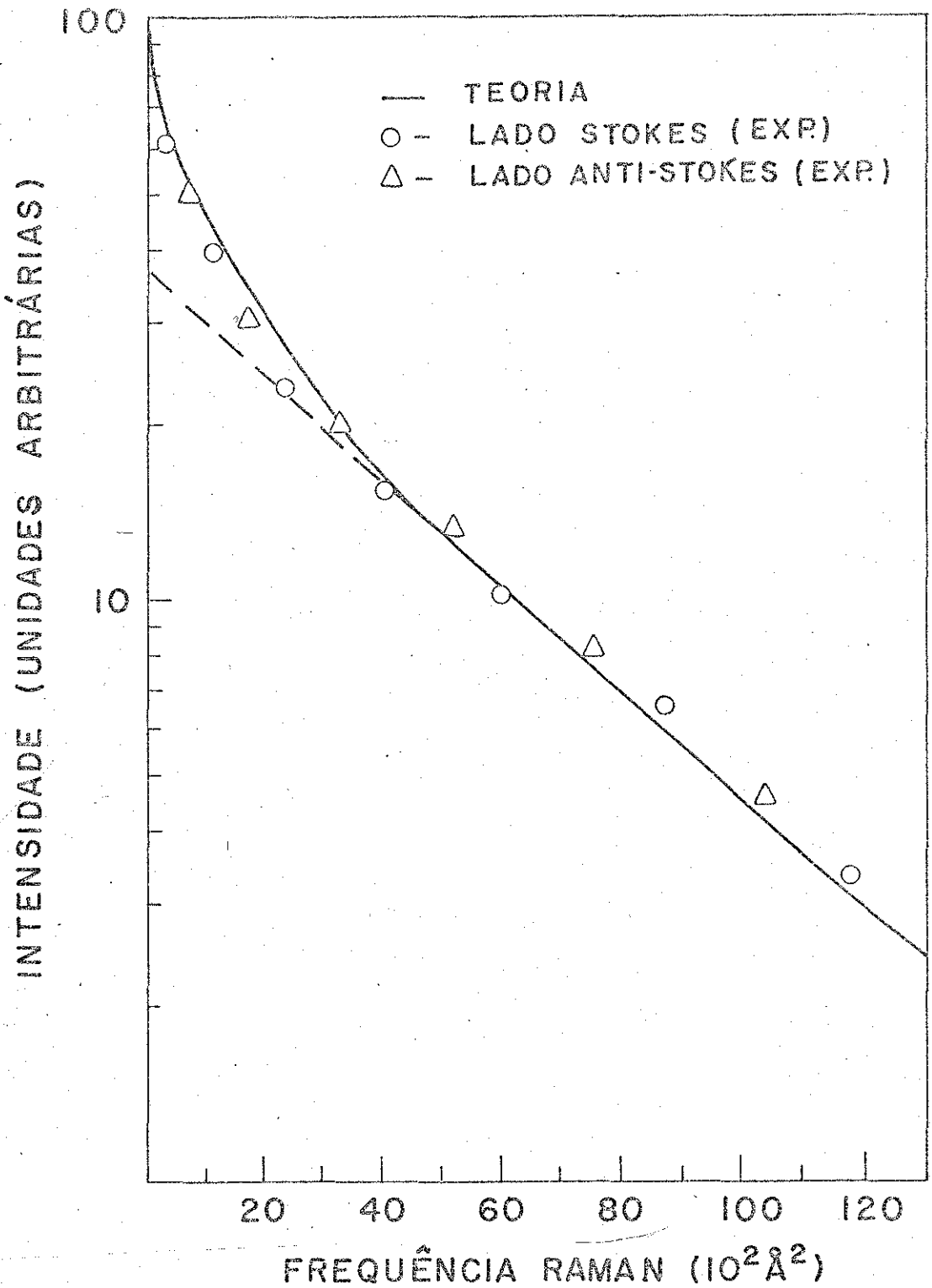


Fig. IV-10. Espectro de espalhamento por quase-partículas individuais para uma amostra de Ga As com $n = 1,7 \times 10^{17} \text{ el/cm}^3$. A linha tracejada é o perfil maxwelliano extrapolado.

ESPALHAMENTO DA LUZ POR MAGNETO-PLASMA EM SÓLIDOS

1. Introdução

Estudaremos neste capítulo um plasma de estado sólido, imerso em um campo magnético constante e uniforme. Tais sistemas são denominados magnetoplasmas e suas propriedades diferem em numerosos aspectos daqueles dos plasmas não magnetizados.

Nosso propósito é estudar como um magneto-plasma espalha a luz. Vários trabalhos experimentais e teóricos foram dedica-dos a este tópico (1-5).

O magneto-plasma que consideraremos é aquele constitui-do pelos eletrons de condução em um semicondutor tipo n, na presen-ça de um campo magnético uniforme e constante \vec{B}_0 . Tal estudo é feito para uma geometria experimental arbitraria, isto é, para qual-quer orientação do vetor de onda transferido ao sistema no processo de espalhamento, \vec{q} , relativa a \vec{B}_0 . Os efeitos da interação coulom-biana entre portadores são extensivamente discutidos.

Como já fizemos no capítulo IV, em virtude do interesse atual em plasmas quentes (6), uma atenção especial será dada ao limi-te de altas temperaturas ($T \gg T_F$).

2. A Secção de Espalhamento

A hamiltoniana de interação eletron radiação é dada pe-la equação (1-III), definindo-se o operador momento \vec{P}_j por

$$\vec{P}_j = \vec{p}_j + \frac{e}{c} \vec{A}_{0j}$$

onde \vec{A}_{0j} é o potencial vetor associado ao campo magnético \vec{B}_0 .

Restringindo-nos a condições experimentais, tais que a frequência incidente seja menor do que o gap entre as bandas, o sistema eletrônico pode ser descrito por uma hamiltoniana de massa efetiva, $H(\vec{k})$, com $\vec{k} = \vec{k} + \frac{e}{c} \vec{A}_0$ (7), ($\vec{k} = -i\nabla$). Dentro desta aproximação a hamiltoniana de interação eletrôn-radiação, ainda conservará a forma dada na equação (1-III) com a densidade de corrente dada por

$$\begin{aligned} \vec{j} = & \frac{e}{c} \sum_j [\partial H(\vec{k} + \frac{e}{c} \vec{A}_0) / \partial \vec{k}] \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) \\ & + \sum_j \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) \partial H(\vec{k} + e/c \vec{A}_0) / \partial \vec{k} \\ & - \frac{e^2}{2c} \sum_j \frac{\partial^2 H}{\partial \vec{k}^2} \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) \vec{A}(\vec{r}_j) \end{aligned} \quad (1)$$

Devido à presença do campo magnético, \vec{B}_0 , introduziremos a representação definida pela equação (25-II). A secção de espalhamento será dada pela equação (14-III) que reescreveremos aqui, por comodidade

$$\frac{d^2 \sigma}{d\omega d\Omega} = \gamma(n_\omega + 1) \frac{1}{\pi} I_m \sum_{\substack{\vec{k} \\ \alpha}} | \{ \vec{k}' \alpha' | V | \vec{k} \alpha \} \{ \vec{k} \alpha | \rho_T | \vec{k}' \alpha' \} | \quad (2)$$

3. Cálculo da flutuação da densidade de carga em campo magnético.

A quantidade $\{ \vec{k} \alpha | \rho_T | \vec{k}' \alpha' \}$, na equação (2), representa a flutuação e na densidade de carga ou spin induzida pelo potencial externo e sua equação de movimento foi deduzida no Capítulo II.

Negligenciando flutuações na densidade de spin (problema que será tratado separadamente no próximo capítulo), a equação (45-II) torna-se

$$\begin{aligned} & \left[i \frac{\partial}{\partial t} - \epsilon(\vec{k}) + \epsilon(\vec{k}') + \frac{ie}{2c} \left[\vec{B}_0 \times (\nabla_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} + \nabla_{\vec{k}'} \epsilon_{\vec{k}'}) \right] \cdot [\nabla_{\vec{k}} + \nabla_{\vec{k}'}] \right] \rho_1(\vec{k}\vec{k}') \\ & + (n_{\vec{k}} - n_{\vec{k}'}) \sum_{\vec{p}\vec{p}'} \langle \vec{k}, \vec{p}' | V_c | \vec{k}', \vec{p} \rangle \rho_1(\vec{p}\vec{p}') \\ & = (n_{\vec{k}'} - n_{\vec{k}}) \langle \vec{k} | V | \vec{k}' \rangle + J_{col} \{ \rho \} \end{aligned} \quad (3)$$

Introduzindo as variáveis \vec{k} e \vec{q} definidas por

$$\vec{k} = \vec{k} - \vec{q}/2, \quad \vec{k}' = \vec{k} + \vec{q}/2 \quad (4)$$

e aproximando as bandas de energia por parábolas, obtem-se

$$\epsilon(\vec{k} + \vec{q}/2) - \epsilon(\vec{k} - \vec{q}/2) = \frac{\vec{q} \cdot \vec{k}}{m^*},$$

$$\nabla_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} + \nabla_{\vec{k}'} \epsilon_{\vec{k}'} = 2 \frac{\vec{q} \cdot \vec{k}}{m^*}$$

e

$$(\nabla_{\vec{k}} + \nabla_{\vec{k}'}) \rho_1(\vec{k}\vec{k}') = \nabla_{\vec{k}} \rho_1(\vec{k}, \vec{q}),$$

sendo \vec{q} o momento transferido ao sistema no processo de espalhamento e m^* a massa efetiva dos eletrons de condução.

Nestas variáveis, a equação (3), torna-se

$$\begin{aligned} & \left[\omega + \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{m^*} + i \frac{\omega_c}{B_0} (\vec{B}_0 \times \vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{k}} \right] \rho(\vec{k}, \vec{q}) - \\ & - \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{m^*} \frac{\partial n_{\vec{k}}}{\partial \epsilon_{\vec{k}}} \sum_{\vec{k}'} W(q) \rho(\vec{k}', \vec{q}) \\ & = \frac{\partial n_{\vec{k}}}{\partial \epsilon_{\vec{k}}} \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{m^*} V(\vec{k}, \vec{q}) + J_{col} \{ \rho \} \end{aligned} \quad (5)$$

onde

$$\rho(\vec{k}, \vec{q}) e^{i\omega t} = \{\vec{k} + \vec{q}/2 | \rho_1 | \vec{k} - \vec{q}/2\}$$

$$V(\vec{k}, \vec{q}) = \langle \vec{k} + \vec{q}/2 | V | \vec{k} - \vec{q}/2 \rangle,$$

$\omega_c = [e B_0 / m^* c]$ é a frequência ciclotrônica e $W(q) = [4\pi e^2 / \epsilon_0 q^2]$

é o elemento de matriz aproximado do potencial coulombiano.

Para resolver a equação (5) escolhemos um sistema de coordenadas com \vec{B}_0 ao longo do eixo z e \vec{q} no plano (x,z) formando um ângulo $\theta_{\vec{q}}$ com o eixo z. Neste sistema de coordenadas

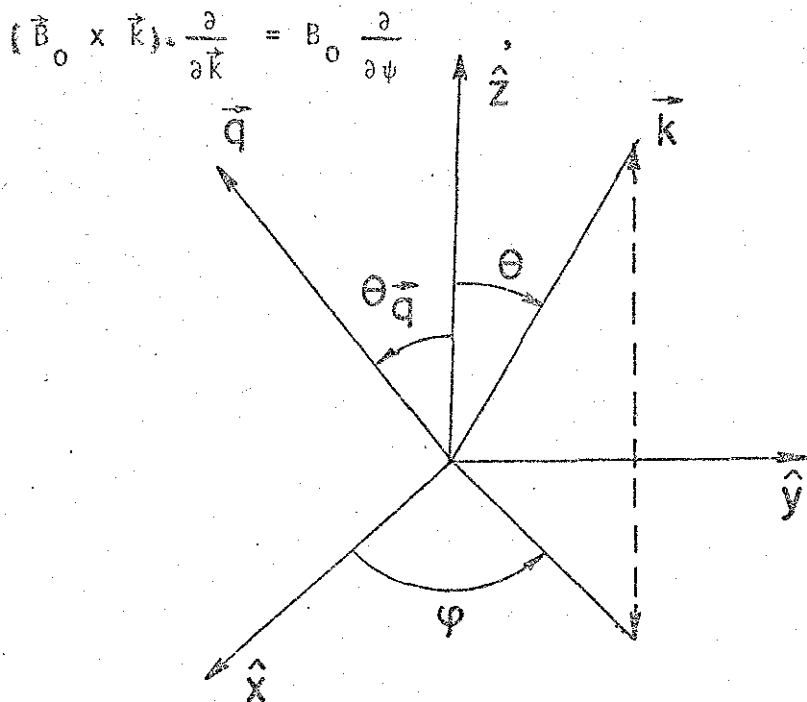


Fig. V-1 - O sistema de coordenadas. O vetor de onda \vec{q} , forma um ângulo $\theta_{\vec{q}}$ com o eixo z e está no plano (xz). O vetor \vec{k} é especificado pelas coordenadas esféricas $|\vec{k}|$, θ e ψ .

e a equação (5) torna-se

$$\left[\omega + \frac{kq}{m^*} (\sin\theta \cos\psi \sin\theta_{\vec{q}} + \cos\theta \cos\theta_{\vec{q}} + i\omega_c \frac{\partial}{\partial \psi}) \right] \rho(\vec{k}, \vec{q}) - \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{m} \sum_{\vec{k}'} W(q) \rho(\vec{k}', \vec{q}) = \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{m^*} V(\vec{k}, \vec{q}) \quad (6)$$

onde incorporamos em ω , na aproximação do tempo de relaxação⁽⁸⁾ de Boltzmann, os possíveis efeitos de colisão.

Introduzindo as funções

$$\lambda(k, \theta) = \frac{\omega}{\omega_c} + \frac{kq}{m^* \omega_c} \cos \theta_{\vec{q}} \cos \theta, \quad (7a)$$

$$g(k, \theta) = \frac{kq}{m^* \omega_c} \sin \theta_{\vec{q}} \sin \theta \quad (7b)$$

e

$$h(k, \theta, \psi) = \frac{\partial n_{\vec{k}}}{\partial \epsilon_{\vec{k}}} \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{m^* \omega_c} \left[\sum_{\vec{k}'} W(q) \rho(\vec{k}', \vec{q}) + V(\vec{k}, \vec{q}) \right] \quad (7c)$$

reescrevemos a equação (6) como

$$\left[\lambda(k, \theta) + g(k, \theta) \cos \psi + i \frac{\partial}{\partial \psi} \right] \rho(k, \theta, \psi) = h(k, \theta, \psi) \quad (8)$$

A equação (8) admite a solução formal

$$\rho(k, \theta, \psi) = -i e^{i(g \sin \psi + \lambda \psi)} \int_{-\psi}^{\psi} e^{-i(g \sin \psi' + \lambda \psi')} h(k, \theta, \psi') d\psi' \quad (9)$$

Para prosseguirmos com a solução, precisamos de uma expressão para $h(k, \theta, \psi)$. Vamos escreve-la como

$$h(k, \theta, \psi) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} A_n(k, \theta) e^{in\psi} \quad (10)$$

A integral que aparece na equação (9) é difícil de ser calculada devido à presença de $\sin \psi$ no expoente do integrando. Podemos, porém, colocá-la em uma forma mais conveniente expandindo

$e^{ig \sin \psi}$ em uma série de funções de Bessel, na forma (9)

$$e^{ig \sin \psi} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_m(g) e^{im\psi} \quad (11)$$

onde as $J_m(g)$ são as funções de Bessel de primeira espécie.

Substituindo as expressões (11) e (10) na equação (9) obtém-se, após realizar a integração em ψ ,

$$\rho(k, \theta, \psi) = e^{i(g \sin \psi + \lambda \psi)} \sum_{p, \ell} A_p(k, \theta) J_\ell(g) \frac{e^{-i(\ell + \lambda - p)\psi}}{\ell + \lambda - p}$$

que, novamente usando a equação (11), transforma-se em

$$\rho(k, \theta, \psi) = \sum_{m, p, \ell} \frac{A_p(k, \theta) J_m(g) J_\ell(g)}{\ell + \lambda - p} e^{i(m+p-\ell)\psi}$$

que escreveremos na forma

$$\rho(k, \theta, \psi) = \sum_n G_n(k, \theta) e^{in\psi} \quad (12)$$

sendo

$$G_n(k, \theta) = \sum_{\ell, m} A_\ell(k, \theta) \frac{J_{m+n}(g) J_{\ell+m}(g)}{\lambda + m} \quad (13)$$

Precisamos agora uma expressão para os coeficientes $A_\ell(k, \theta)$.

Substituindo a expansão (12) na equação (7-c), obtém-se

$$\begin{aligned} h(k, \theta, \psi) &= \frac{\partial n_{\vec{k}}}{\partial \epsilon_{\vec{k}}} \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{m^* \omega_c} V(\vec{k}, \vec{q}) + \\ &+ \frac{\partial n_{\vec{k}}}{\partial \epsilon_{\vec{k}}} W(q) \left[\frac{V_0}{8\pi^3} \right] \sum_n \int_0^\infty dk k^2 \int_0^\pi d\theta \sin \theta G_n(k, \theta) \int_0^{2\pi} d\psi e^{in\psi} \\ &= \frac{\partial n_{\vec{k}}}{\partial \epsilon_{\vec{k}}} \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{m^* \omega_c} W(q) I_0 + \frac{\partial n_{\vec{k}}}{\partial \epsilon_{\vec{k}}} \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{m^* \omega_c} V(\vec{k}, \vec{q}) \end{aligned} \quad (14)$$

sendo

$$I_0 = \frac{v_0}{8\pi^3} \int_0^\infty dk k^2 \int_0^\pi d\theta \sin\theta G_0(k, \theta) \quad (14-a)$$

e

$$G_0(k, \theta) = \sum_{\ell, m} A_\ell(k, \theta) \frac{J_m(g) J_{\ell+m}(g)}{\lambda + m} \quad (14.b)$$

Por outro lado, da equação (10), temos

$$A_\ell(k, \theta) = \int_0^{2\pi} h(k, \theta, \psi) e^{-i\ell\psi} d\psi \quad (15)$$

que com a equação (14) torna-se

$$A_\ell(k, \theta) = \frac{\partial n}{\partial \epsilon} W(q) I_0 \int_0^\pi \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{m^* \omega_c} e^{-i\ell\psi} d\psi + \\ + v_0/8\pi^3 \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \int_0^{2\pi} \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{m^* \omega_c} v(\vec{k}, \vec{q}) e^{-i\ell\psi} d\psi \quad (16)$$

Com as equações (16) e (14-b), I_0 resulta em

$$I_0 = W(q) I_0 \sum_{\ell} \int_0^\infty dk k^2 \frac{\partial n_{\vec{k}}}{\partial \epsilon_{\vec{k}}} \times \\ \times \int_0^{2\pi} d\theta \sin\theta \frac{J_m J_{m+\ell}}{\lambda + m} \int_0^{2\pi} d\psi \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{m^* \omega_c} e^{-i\ell\psi} \\ + v_0/8\pi^3 \sum_{m\ell} \int_0^\infty dk k^2 \frac{\partial n_{\vec{k}}}{\partial \epsilon_{\vec{k}}} \int_0^\pi d\theta \sin\theta \frac{J_m J_{\ell+m}}{\lambda + m} \int_0^\pi d\psi \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{m^* \omega_c} v(\vec{k}, \vec{q}) e^{-i\ell\psi}$$

ou seja

$$I_0 = \frac{\tilde{L}}{1 + W(q)L}, \quad (17)$$

sendo as funções L e \tilde{L} dadas por

$$L = v_0/8\pi^3 \sum_{m\ell} \int_0^\infty dk k^2 \frac{\partial n_{\vec{k}}}{\partial \epsilon_{\vec{k}}} \int_0^\pi d\theta \sin\theta \frac{J_m J_{m+p}}{\lambda + m} \int_0^\pi d\psi \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{m^* \omega_c} e^{-ip\psi} \quad (18)$$

e

$$\tilde{L} = (v_0/8\pi^3) \sum_{mp} \int_0^\infty dk k^2 \frac{\partial n_{\vec{k}}}{\partial \epsilon_{\vec{k}}} \int_0^\pi d\theta \sin\theta \frac{J_m J_{m+p}}{\lambda + m} \int_0^{2\pi} d\psi \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{m^* \omega_c} V(\vec{k}, \vec{q}) e^{-ip\psi} \quad (19)$$

Substituindo agora a equação (17) na equação (16), os coeficientes $A_\ell(k, \theta)$ serão dados por

$$A_\ell(k, \theta) = \frac{W(q) \tilde{L}}{1 - W(q)L} \alpha(k, \theta) + \beta(k, \theta) \quad , \quad (20)$$

onde

$$\alpha(k, \theta) = - \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \int_0^{2\pi} d\psi \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{m^* \omega_c} e^{-i\ell\psi} \quad (21)$$

e

$$\beta(k, \theta) = \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \int_0^{2\pi} d\psi \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{m^* \omega_c} V(k, \theta, \psi) e^{-i\ell\psi} \quad (22)$$

Uma vez determinados os coeficientes $A_\ell(k, \theta)$ podemos substituí-los na equação (13) e com a equação (12) calcular a flutuação $\rho(\vec{k}, \vec{q})$, que pretendíamos.

4. Cálculo da Secção de Espalhamento

Substituindo-se $\rho(\vec{k}, \vec{q}, \omega)$, calculado como na secção anterior, na equação (2), obtêm-se a secção de espalhamento para o processo considerado.

Escrevamos a equação (2) como

$$\frac{d^2 \sigma}{d\omega d\Omega} = (n_\omega + 1) \frac{1}{\pi} \text{Im } R(\vec{q}, \omega) \quad (23)$$

sendo

$$\begin{aligned}
 R &= \sum_{\vec{k}} \rho(\vec{k}, \vec{q}) V^*(\vec{k}, \vec{q}) \\
 &= \frac{v_0}{8\pi^3} \sum_n \int dk k^2 \int_0^\pi d\theta \sin\theta G_n(k, \theta) \int_0^\pi d\psi V^*(k, \theta, \psi) e^{in\psi}
 \end{aligned}
 \tag{24}$$

se $\rho(\vec{k}, \vec{q})$ for escrito na forma dada pela equação (12).

A equação (24) pode ainda ser escrita como

$$\begin{aligned}
 R(\vec{q}, \omega) &= \sum_n \frac{v_0}{8\pi^3} \frac{W(q) \tilde{L}}{1 - W(q)L} \int_0^\infty dk k^2 \int_0^\pi d\theta \sin\theta \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \times \\
 &\times \sum_{mp} \frac{J_{m+n} J_{m+p}}{\lambda + m} \int_0^{2\pi} d\psi \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{m^* \omega_c} e^{-ip\psi'} \int_0^{2\pi} d\psi V(k, \theta, \psi) e^{in\psi} + \\
 &+ \int_0^\infty dk k^2 \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \int_0^\pi d\theta \sin\theta \sum_{mp} \frac{J_{m+n} J_{m+p}}{\lambda + m} \int_0^{2\pi} d\psi \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{m^* \omega_c} V(k, \theta, \psi) e^{-in\psi} \times \\
 &\times \int_0^{2\pi} d\psi' V^*(k, \theta, \psi') e^{in\psi'} d\psi'
 \end{aligned}$$

onde fizemos uso da equação (13) para $G_n(k, \theta)$ e já introduzimos os coeficientes $A_\ell(k, \theta)$ dados na equação (20).

Definindo as funções

$$\begin{aligned}
 Q(\vec{q}, \omega) &= (v_0/8\pi^3) \sum_{mnp} \int_0^\infty dk k^2 \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \int_0^\pi d\theta \sin\theta \frac{J_{m+n}(g) J_{m+p}(g)}{\lambda + m} \times \\
 &\times \int_0^{2\pi} d\psi \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{m^* \omega_c} e^{-ip\psi} d\psi \int_0^{2\pi} d\psi' V^*(k, \theta, \psi') e^{in\psi'}
 \end{aligned}
 \tag{25}$$

e

$$\tilde{Q}(q, \omega) = (V/8\pi^3) \sum_{mnp} \int_0^\infty dk k^2 \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \int_0^\pi d\theta \sin\theta \frac{J_{m+n}(q) J_{m+p}(q)}{\lambda + m} \times$$

$$\times \int_0^{2\pi} d\psi \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{m^* \omega_c} V(k, \theta, \psi) e^{-ip\psi} d\psi : \int_0^\pi d\psi' V^*(k, \theta, \psi') e^{in\psi'} \quad (26)$$

R será reescrita, em uma forma mais compacta, como

$$R = -W(q) \frac{\tilde{L}Q}{1+W(q)L} + \tilde{Q} \quad (27)$$

ou

$$R = \frac{\tilde{Q}}{1+W(q)L} + W(q) \frac{\tilde{L}Q + \tilde{L}Q}{1+W(q)L} \quad (28)$$

Na próxima secção particularizaremos esta expressão geral, para o caso de um semiconductor de banda parabólica.

5. Aplicação para um semiconductor com banda parabólica

No caso de semicondutores de banda parabólica a contribuição para a energia de interação proveniente do termo A^2 , se reduz ao elemento de matriz constante dado na equação (IV-6).

Neste caso, das equações (19), (25) e (26) conclue-se que

$$\tilde{L} = Q = \frac{\tilde{Q}}{V} = VL \quad (29)$$

Este resultado implica que a segunda parcela da equação (28) se anula ($\tilde{L}Q = \tilde{L}Q$). Para um semiconductor de banda não parabólica, tal cancelamento não ocorre, e este termo torna-se a principal contribuição (1,11).

Com o resultado (29) a equação (28) torna-se

$$R = v^2 \left[\frac{L}{1+W(q)L} \right] \quad (30)$$

cujas partes imaginária, que é aquela que reflete o espectro Raman, pode ser escrita como

$$I_{Im} R = \frac{|v|^2}{W(q)} \operatorname{Im} \frac{1}{\epsilon(\vec{q}, \omega)} \quad (31)$$

onde

$\epsilon(\vec{q}, \omega) = 1 + W(q) L(\vec{q}, \omega)$, é a função dielétrica para um gás de elétrons na presença de um campo magnético uniforme e constante.

A função $L(\vec{q}, \omega)$, dada na equação (18), depois de efetuada a integração na variável ψ , torna-se

$$L(\vec{q}, \omega) = (v/8\pi^3) \sum_m \int dk k^2 \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \int d\theta \operatorname{sen} \theta \frac{J_m^2(g)}{\lambda + m} \frac{kq}{m^* \omega_c} \cos \theta_{\vec{q}} \cos \theta +$$

$$+ (v/8\pi^3) \sum_m \int dk k^2 \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \int d\theta \operatorname{sen} \theta \frac{J_m(J_{m+1} + J_{m-1})}{\lambda + m} \frac{kq}{2m^* \omega_c} \operatorname{sen} \theta_{\vec{q}} \operatorname{sen} \theta$$

Fazendo uso da seguinte fórmula de recorrência (12)

$$J_{m+1}(x) + J_{m-1}(x) = \frac{2m}{x} J_m(x),$$

e com as equações (7-a) e (7-b), obtém-se

$$L = \sum_{m=-\infty}^{\infty} (v/8\pi^3) \int_0^{\infty} dk k^2 \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \times$$

$$\times \int_0^{\pi} d\theta \operatorname{sen} \theta J_m^2(g) \frac{m\omega_c + (kq/m^*) \cos \theta_{\vec{q}} \cos \theta}{\omega + m\omega_c + (kq/m^*) \cos \theta_{\vec{q}} \cos \theta} \quad (32)$$

A equação (31) nos mostra que o espectro Raman apresentará picos para valores de ω próximos das raízes de

$$\operatorname{Re} \epsilon(\vec{q}, \omega) = 0$$

6. A Geometria de Faraday ($\vec{q} \times \vec{B}_0 = 0$)

Consideremos o caso para o qual o vetor de onda \vec{q} , da excitação elementar criada no sistema, seja paralelo ao campo magnético \vec{B}_0 , isto é $\theta_{\vec{q}} = 0$, portanto $g = 0$ e a soma sobre o número infinito de funções de Bessel se reduz ao termo constante de ordem zero ($J_0(0) = 1$, $J_m(0) = 0$ para $m \neq 0$).

A função $L(\vec{q}, \omega)$ torna-se

$$L(\vec{q}, \omega) = (v_0/8\pi^3) \int_0^\infty dk k^2 \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \int_0^\pi \frac{kq}{m^*} \frac{\sin \theta \cos \theta d\theta}{\omega + (kq/m^*) \cos \theta}, \quad (33)$$

isto é, coincide com a função $F(\vec{q}, \omega)$ introduzida no capítulo IV.

Conclue-se então que, para a propagação ao longo do campo magnético, o espectro não sofrerá influências do campo magnético, a não ser em possíveis excitações de quase-partículas, localizadas nas singularidades de $L(\vec{q}, \omega)$.

Para $T = 0^\circ K$, as frequências destas excitações estão limitadas por

$$\omega = m\omega_c \pm qv_F \quad (34)$$

Estas linhas estão desenhadas na figura V-2.

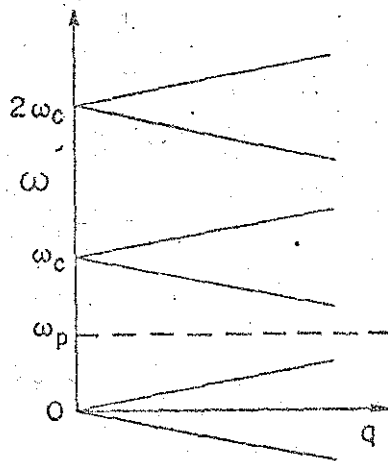


Fig.V-2 - Relação de dispersão na geometria paralela. A linha tracejada corresponde ao plasmon (que não é afetado por um campo magnético paralelo a sua direção de propagação).

7. A Geometria de Voigt ($\vec{q} \cdot \vec{B}_0 = 0$)

7.a-A função $L(\vec{q}, \omega)$ na geometria perpendicular

Um caso particular de bastante interesse, tanto experimental, quanto teórico (2-4) é aquele para o qual a onda de magneto-plasma se propaga na direção perpendicular ao campo magnético ($\theta_{\vec{q}} = \pi/2$).

Da equação (32), com $\theta_{\vec{q}} = \pi/2$, a função $L(\vec{q}, \omega)$ torna-se

$$L(\vec{q}, \omega) = \frac{v_0}{8\pi^3} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{m\omega_c}{\omega + m\omega_c} \int_0^{\infty} dk k^2 \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \int_0^{\infty} d\theta \sin\theta J_m^2(g), \quad (35)$$

com

$$g = (kq/m^*\omega_c) \sin\theta$$

Fazendo uso da relação (13)

$$\int_0^{\pi} d\theta \sin\theta J_n^2(a \sin\theta) = \frac{2}{a} \sum_{\ell=0}^{\infty} J_{2\ell+2m+1}^2(a) \quad (2a) \quad (35a)$$

obtem-se

$$L(\vec{q}, \omega) = \frac{v_0}{8\pi^3} \frac{2m^*\omega_c}{q} \sum_{m=1}^{\infty} m\omega_c \left[\frac{1}{\omega + m\omega_c} - \frac{1}{\omega - m\omega_c} \right] \times$$

$$\times \sum_{\ell=0}^{\infty} \int_0^{\infty} dk k^2 \frac{\partial n}{\partial \epsilon} J_{2\ell+2m+1}^2(2kq/m^*\omega_c) \quad (36)$$

Com a equação (31), a secção de espalhamento, dada na equação (23), é reescrita como

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega} = r_0^2 (\vec{e}_L \cdot \vec{e}_S)^2 \frac{\omega_S}{\omega_L} (n_{\omega} + 1) \text{Im} \frac{L(\vec{q}, \omega)}{|\epsilon(\vec{q}, \omega)|^2} \quad (37)$$

onde r_0 é o raio clássico efetivo do elétron.

Desprezando quaisquer efeitos de relaxação que levem a um tempo de vida finito as oscilações criadas no sistema ($\omega_c \tau \rightarrow \infty$), vemos das equações (36) e (37), que o espectro constará de uma série de linhas agudas nas frequências $\omega = m\omega_c$.

A equação (37) também nos mostra que para um gás não interagindo, a seção de espalhamento é dada por

$$\left[\frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega} \right]_0 = r_0^2 (\vec{e}_L \cdot \vec{e}_S)^2 \frac{\omega_S}{\omega_L} (n_{\omega} + 1) \text{Im } L(\vec{q}, \omega) \quad (38)$$

e todo o efeito da interação elétron-elétron \bar{e} , analogamente ao plasma livre, introduzir um fator inversamente proporcional ao quadrado do módulo da constante dielétrica $\epsilon(\vec{q}, \omega)$.

7.b - O gás degenerado na geometria perpendicular

Para $T = 0^0\text{K}$, a integração na variável k , indicada na equação (36), pode ser feita facilmente, e obtemos

$$L = \frac{m^*\omega_c}{q} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{\ell=0}^{\infty} m\omega_c \left[\frac{1}{\omega + m\omega_c} - \frac{1}{\omega - m\omega_c} \right] J_{2\ell+2m+1}(2q v_F / \omega_c) \quad (40)$$

O espectro, para um gás não interagindo, obtem-se das equações (40) e (38), como

$$\left[\frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega} \right]_0 = r_0^2 (\vec{e}_L \cdot \vec{e}_S)^2 \frac{\omega_S}{\omega_L} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{m\omega_c \tau}{(\omega - m\omega_c)^2 \tau^2 + 1} * \sum_{\ell=0}^{\infty} J_{2\ell+2m+1}(2q v_F / \omega_c) \quad (41)$$

onde introduzimos fenomenologicamente um tempo de relaxação τ , substituindo ω por $\omega + i/\tau$, responsável por possíveis mecanismos de absorção (2,8).

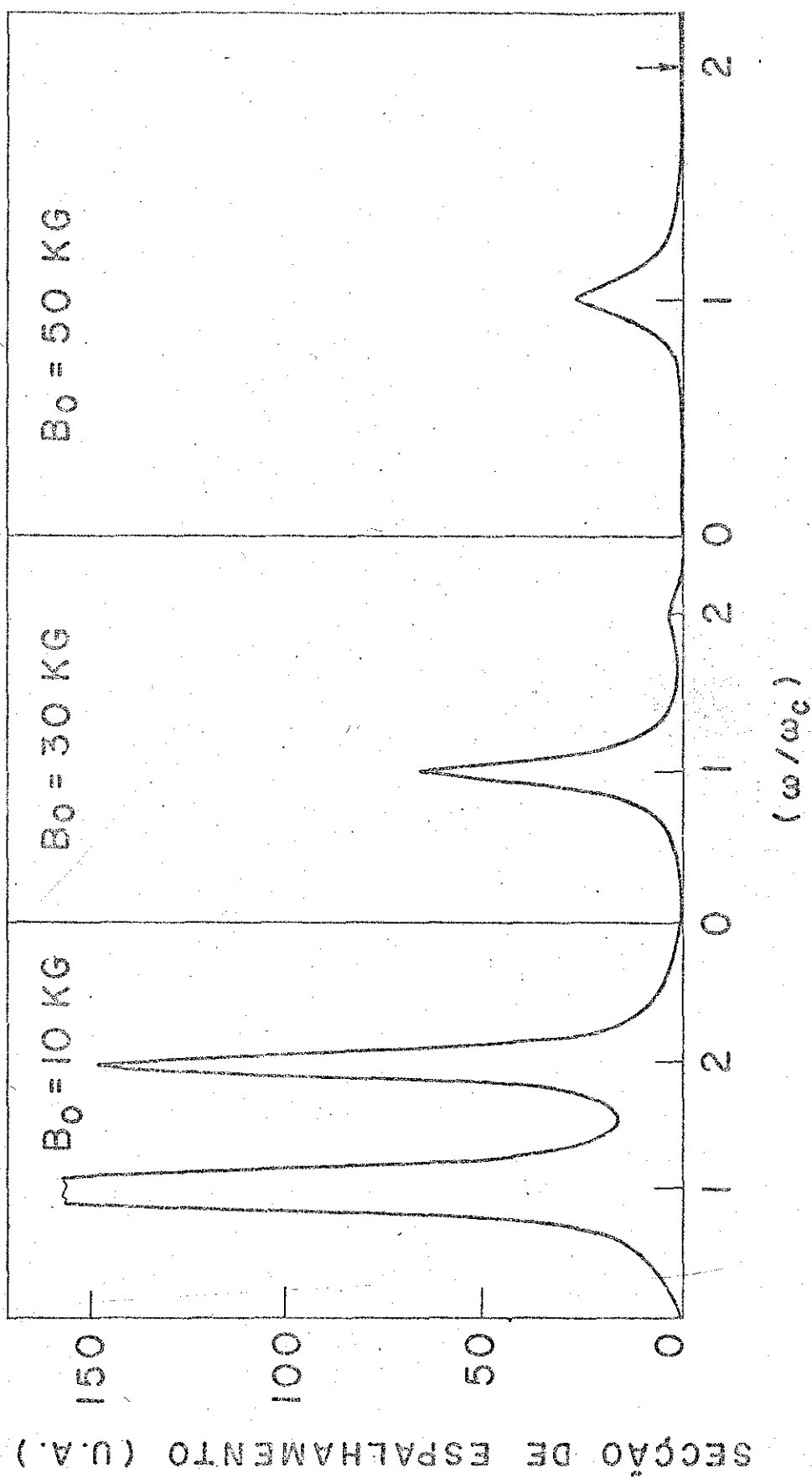


Fig. V-3. Espectro para um gás não interagindo na geometria perpendicular, a temperatura de 0°K e para $\omega_c \tau = 10$.

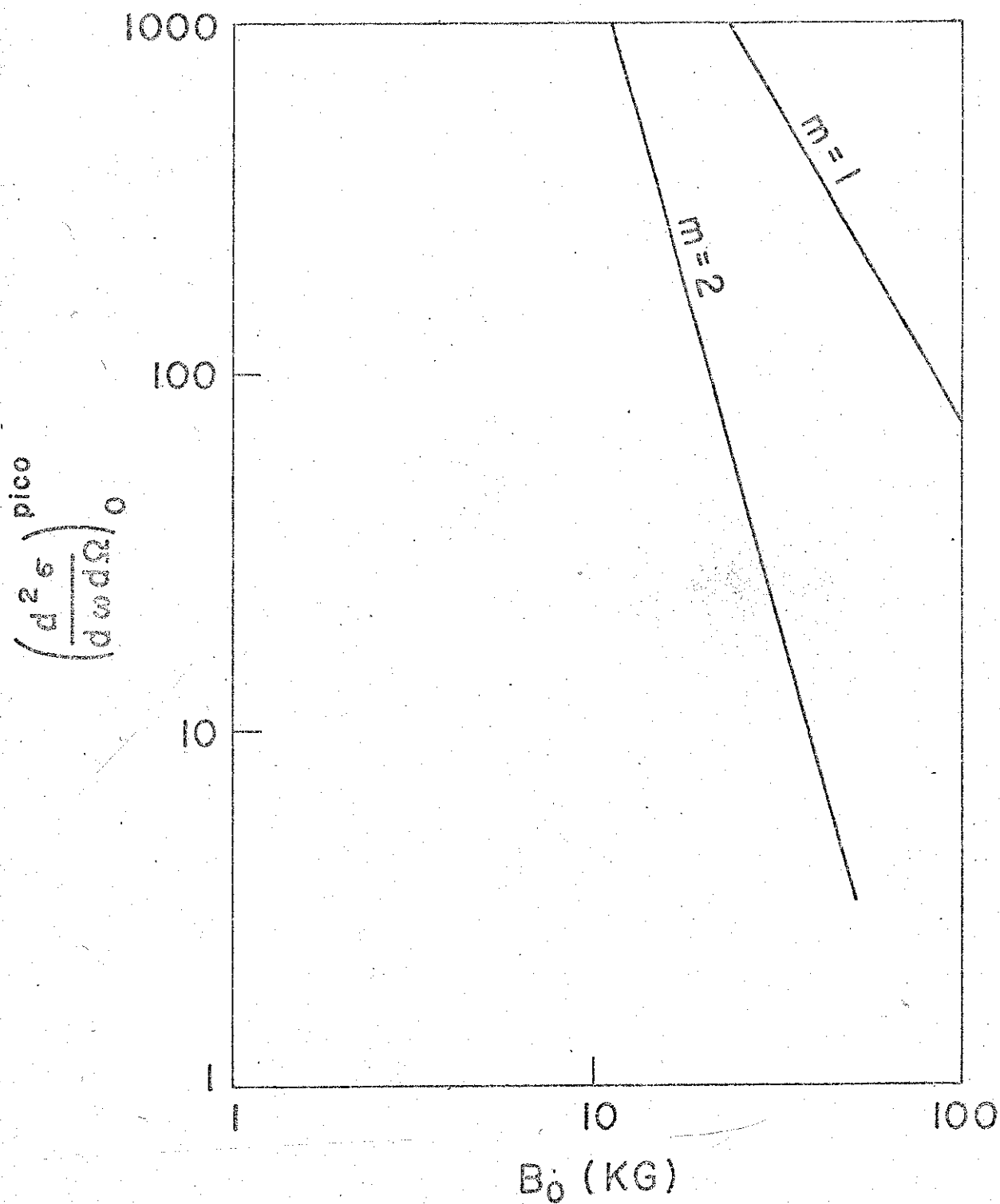


Fig. V-4. Intensidade da linha Raman, para um gas degenerado ($\tau = 0^\circ\text{K}$) não interagindo na geometria perpendicular em função do campo magnético.

Um gráfico típico da secção de espalhamento para um gás não interagindo está desenhado na figura (V-3) para diferentes valores do campo magnético.

Observamos que, para campos crescentes, a intensidade das linhas centradas em ω_c , $2\omega_c$, ..., diminui.

Este efeito é posto em relevância na figura (V-4) onde desenhamos as intensidades das linhas $m = 1$ e $m=2$ em função do campo magnético. Como era de se esperar, a intensidade diminui com $(qR_B)^{-2m}$, sendo R_B o raio ciclotrônico.

A constante dielétrica, para o magnetoplasma, na geometria perpendicular, torna-se

$$\epsilon(\vec{q}, \omega) = 1 + 6 \frac{\omega_p^2 \omega_c}{q^3 v_F^3} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{\ell=0}^{\infty} m \omega_c \left[\frac{1}{\omega + m \omega_c} - \frac{1}{\omega - m \omega_c} \right] \times \\ \times J_{2\ell+2m+1} (2q v_F / \omega_c) , \quad (42)$$

onde ω_p é a frequência de plasma.

No limite de grandes comprimentos de onda, desenvolvendo a equação (42) até a segunda ordem em (q/k_F) , sendo k_F o momento de Fermi, a constante dielétrica será escrita como

$$\epsilon(\vec{q}, \omega) \approx 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - \omega_c^2} + \frac{q^2 v_F^2}{5 \omega_c^2} \left[\frac{\omega_p^2}{\omega^2 - \omega_c^2} - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - 4\omega_c^2} \right] . \quad (44)$$

Na dedução da equação (44) a função de Bessel foi expressa pelo seu desenvolvimento em série (14)

$$J_\nu(x) = \left(\frac{x}{2}\right)^\nu \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{j! \Gamma(j+\nu+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2j} \quad (45)$$

e considerou-se apenas as parcelas pertinentes à aproximação feita.

A relação de dispersão para as excitações de magneto-

plasma são dadas pelas raízes da equação

$$\epsilon(\vec{q}, \omega) = 0 \quad ..$$

Obtemos então,

$$\omega_{\pm}^2 = \frac{1}{2} \left\{ 5\omega_c^2 + \omega_p^2 \pm \left[(3\omega_c^2 - \omega_p^2)^2 + \frac{12}{5} q^2 v_F^2 \omega_p^2 \right]^{1/2} \right\}$$

Para $q = 0$ as soluções tornam-se

$$\omega_+^2 = 4\omega_c^2,$$

$$\omega_-^2 = \omega_p^2 + \omega_c^2$$

A primeira delas corresponde ao primeiro modo de Bernstein (15) e a segunda, ao modo híbrido superior (2).

7.c - 0 gás não degenerado na geometria perpendicular

Para o gás não degenerado ($T \gg T_F$), a função $L(\vec{q}, \omega)$ torna-se

$$L(q, \omega) = A \beta \frac{m^* \omega_c}{q} \sum_{m=1}^{\infty} 2m\omega_c \left[\frac{1}{\omega + m\omega_c} - \frac{1}{\omega - m\omega_c} \right] \times \\ \times \sum_{\ell=0}^{\infty} \int_0^{\infty} dk k^2 e^{-\beta k^2 / 2m^*} J_{2\ell+2m+1}^2(2kq/m^*\omega_c)$$

onde $A = 4\pi^3 n_e / (2\pi m^* K_B T)^{3/2}$, sendo n_e a concentração eletrônica.

A integração na variável k pode ser realizada fazendo uso da relação (16)

$$\int_0^{\infty} x e^{-\alpha x^2} J_{\nu}(bx) dx = \frac{\sqrt{\pi} b}{(8\alpha)^{3/2}} e^{-b^2/8\alpha} \left[I_{\frac{(\nu-1)}{2}}(b^2/8\alpha) - I_{(\nu+1)/2}(b^2/8\alpha) \right],$$

(46)

onde as I_{ν} são as funções de Bessel de segunda espécie.

Obtem-se então

$$L(\vec{q}, \omega) = A\beta \frac{\sqrt{\pi}}{8} m^*{}^3 v_t^3 e^{-\lambda} \sum_m 2m\omega_c \left[\frac{1}{\omega + m\omega_c} - \frac{1}{\omega - m\omega_c} \right] \times \\ \times \sum_{\ell=0}^{\infty} [I_{\ell+m}(\lambda) - I_{\ell+m+1}(\lambda)] ,$$

com $\lambda = q^2 v_t^2 / 2\omega_c^2$ e v_t a velocidade térmica.

A soma em ℓ pode ser agora efetuada de modo a obter

$$L = A\beta \sqrt{\pi} m^*{}^3 v_t^3 e^{-\lambda} \sum_{m=1}^{\infty} 2m\omega_c \left[\frac{1}{\omega + m\omega_c} - \frac{1}{\omega - m\omega_c} \right] I_m(\lambda) \quad (47)$$

A constante dielétrica será agora escrita como

$$\epsilon(\vec{q}, \omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_c^2} \frac{e^{-\lambda}}{\lambda} \sum_m m\omega_c \left[\frac{1}{\omega + m\omega_c} - \frac{1}{\omega - m\omega_c} \right] I_m(\lambda) \quad (48)$$

Para valores de $q \gg q_D$, sendo q_D o comprimento de Debye, retendo apenas os termos do desenvolvimento em série da função de Bessel de segunda espécie (17),

$$I_m(x) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{1}{\ell! (\ell+m)!} \left(\frac{x}{2} \right)^{m+2\ell} , \quad (49)$$

que dêem contribuições até a segunda ordem em (q/q_D) , a constante dielétrica será escrita como

$$\epsilon(\vec{q}, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - \omega_c^2} + \frac{q^2 v_t^2}{2 \omega_c^2} \left[\frac{\omega_p^2}{\omega^2 - \omega_c^2} - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - 4\omega_c^2} \right] \quad (50)$$

que coincide com o resultado de Platzmann e Wolff (2).

8. A Geometria Geral

8.a - A função $L(\vec{q}, \omega)$ na Geometria Geral

Para um ângulo $\theta_{\vec{q}}$, qualquer, a função $L(\vec{q}, \omega)$ é dada

pela equação (32).

Considerando o limite $\omega_c \tau \rightarrow \infty$ e escrevendo

$$L = L_1 + iL_2 ,$$

obtem-se

$$L_2 = \frac{v_0}{8\pi^3} \pi \left[\cos \theta_{\vec{q}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} dk \frac{k^3 q}{m^*} \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \int_0^{\pi} d\theta \operatorname{sen} \theta J_m^2(g) \times \right. \\ \left. \times \cos \theta \delta(\omega + m\omega_c + \frac{kq}{m^*} \cos \theta_{\vec{q}} \cos \theta) + \right. \\ \left. + \sum_{m=-\infty}^{\infty} m\omega_c \int_0^{\infty} dk k^2 \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \int_0^{\pi} d\theta \operatorname{sen} \theta J_m^2(g) \delta(\omega + m\omega_c + \frac{kq}{m^*} \cos \theta_{\vec{q}} \cos \theta) \right] ,$$

e integrando na variável θ

$$L_2 = \frac{v_0}{8\pi^3} \pi \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{k_{\min}}^{\infty} dk k^2 \left(- \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \right) \frac{\omega}{\frac{kq}{m^*} |\cos \theta_{\vec{q}}|} J_m^2(\bar{g}) , \quad (51)$$

sendo,

$$k_{\min} = \frac{|\omega + m\omega_c| m^*}{q |\cos \theta_{\vec{q}}|} \quad (51a)$$

e

$$\bar{g} = \frac{kq}{m^* \omega_c} \operatorname{sen} \theta_{\vec{q}} \left[1 - \left(\frac{k_{\min}}{k} \right)^2 \right] \quad (51b)$$

A parte real exige um tratamento matemático tedioso.

Quando ω atinge valores múltiplos de ω_c , isto é,

$\omega = \pm \bar{m} \omega_c$, a parcela correspondente a \bar{m} , na equação (32), será

$$L_1(\bar{m}) = \frac{v_0}{8\pi^3} \frac{q \cos \theta_{\vec{q}}}{m^*} \int_0^{\infty} dk k^3 \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \times \\ \times \int_0^{\pi} d\theta \operatorname{sen} \theta J_{\bar{m}}^2(g) / (kq/m^*) \cos \theta_{\vec{q}} \cos \theta + \\ + \frac{v_0}{8\pi^3} \bar{m} \omega_c \int_0^{\infty} dk k^2 \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \int_0^{\pi} d\theta \operatorname{sen} \theta J_{\bar{m}}^2(g) / (kq/m^*) \cos \theta_{\vec{q}} \cos \theta .$$

A segunda contribuição é nula e a primeira pode ser integrada com o auxílio de (35-a) de modo a obter

$$L_1(\vec{m}) = \frac{2m^* \omega_c}{q \sin \theta_{\vec{q}}} \sum_{\ell=0}^{\infty} \int_0^{\infty} dk k \frac{\partial n}{\partial \epsilon} J_{2\ell+2m+1} (2kq \sin \theta_{\vec{q}} / m^* \omega_c) \quad (52)$$

Então

$$L_1 = L_1(\vec{m}) + \sum_{m \neq \vec{m}} L_1(m)$$

Para $(\omega + m\omega_c) \neq 0$, podemos escrever

$$\frac{1}{\omega + m\omega_c + \frac{kq}{m^*} \cos \theta_{\vec{q}} \cos \theta} = \frac{1}{\omega + m\omega_c} \left\{ 1 - \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{kq}{m^*} \frac{\cos \theta_{\vec{q}} \cos \theta}{\omega + m\omega_c} \right]^n \right\}$$

e juntamente com o desenvolvimento em série do quadrado da função de Bessel (14),

$$J_m^2(x) = \left(\frac{x}{2}\right)^{2m} \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{(-1)^\ell (2m+2\ell)! (x/2)^{2\ell}}{[(\ell+m)!]^2 (2m+\ell)! \ell!},$$

nos permitirá escrever $L_1(\vec{q}, \omega)$ como

$$L_1(\vec{q}, \omega) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} L_1(m) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{a_{\ell m}}{(\omega + m\omega_c)} \int_0^{\infty} dk k^2 \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \times$$

$$\times \int_0^{\pi} d\theta \sin \theta \sin \theta (m\omega_c + \frac{kq}{m^*} \cos \theta_{\vec{q}} \cos \theta) \times$$

$$\times \left\{ 1 - \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{kq}{m^*} \frac{\cos \theta_{\vec{q}} \cos \theta}{\omega + m\omega_c} \right]^n \right\} \times \left[\frac{kq}{2m^*} \sin \theta_{\vec{q}} \sin \theta \right]^{2(m+\ell)}$$

onde

$$a_{\ell m} = \frac{(-1)^\ell (2m+2\ell)!}{[(\ell+m)!]^2 (2m+\ell)! \ell!} \quad (53)$$

A integração na variável θ pode ser feita com o auxílio de

$$\int_0^\pi (\operatorname{sen} \theta)^{2v+1} (\cos \theta)^p d\theta = \begin{cases} 0 & \text{se } p \text{ for ímpar} \\ \frac{2(2v)!! (p-1)!!}{(2n+p+1)!!} & \text{se } p \text{ for par} \end{cases}$$

Obtemos finalmente

$$\begin{aligned} L_1(m) = & \cos \theta \rightarrow q \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{a_{\ell m} b_{\ell mn}}{(\omega + m\omega_c)^{n+1}} \int_0^\infty dk k^2 \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \left(\frac{kq}{m^*} \right)^n (\cos \theta \rightarrow q)^n \times \\ & \times \left[\frac{kq}{2m^* \omega_c} \operatorname{sen} \theta \rightarrow q \right]^{2(\ell+m)} + m\omega_c \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{a_{\ell m} c_{\ell m}}{\omega + m\omega_c} \int_0^\infty dk k^2 \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \left[\frac{kq}{2m^* \omega_c} \operatorname{sen} \theta \rightarrow q \right]^{2(\ell+m)} + \\ & + m\omega_c \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{n=2}^{\infty} \frac{a_{\ell m} d_{\ell mn}}{(\omega + m\omega_c)^{n+1}} \int_0^\infty dk k^2 \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \left[\frac{kq}{m^*} \cos \theta \rightarrow q \right]^n \left[\frac{kq}{2m^* \omega_c} \operatorname{sen} \theta \rightarrow q \right]^{2(\ell+m)} \end{aligned} \quad (54)$$

$$\text{sendo } b_{\ell mn} = 2 \frac{(2\ell+2m)!! n!!}{(2\ell+2m+n+2)!!}, \quad c_{\ell m} = 2 \frac{(2\ell+2m)!!}{(2\ell+2m+1)!!}$$

$$d_{\ell mn} = \frac{2 \cdot (2\ell+2m)!! (n-1)!!}{(2\ell+2m+n+1)!!}$$

A linha, na primeira contribuição à equação (54), indica que são devemos considerar valores ímpares de n e as duas linhas, na terceira contribuição, indicam que são devemos considerar valores pares de n .

8.b - 0 gás degenerado

Para $T = 0^\circ K$ podemos integrar a equação (51), na variável k , de modo a obter

$$L_2 = g_0 \frac{\omega}{q v_F |\cos \theta \rightarrow q|} \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_m^2(\bar{g}) \theta \left(\frac{\omega + m\omega_c}{q v_F \cos \theta \rightarrow q} \right) \quad (55)$$

onde g_0 é a densidade de estados no nível de Fermi,

$$\bar{g} = \frac{qv_F}{\omega_c} \sin \theta_{\vec{q}} \left[1 - \left[\frac{\omega + m\omega_c}{qv_F \cos \theta_{\vec{q}}} \right]^2 \right]^{1/2},$$

e $\theta(x)$ a função degrau.

Substituindo-se o resultado (55) na equação (38), obtêm-se o espectro do gás degenerado não interagindo, como

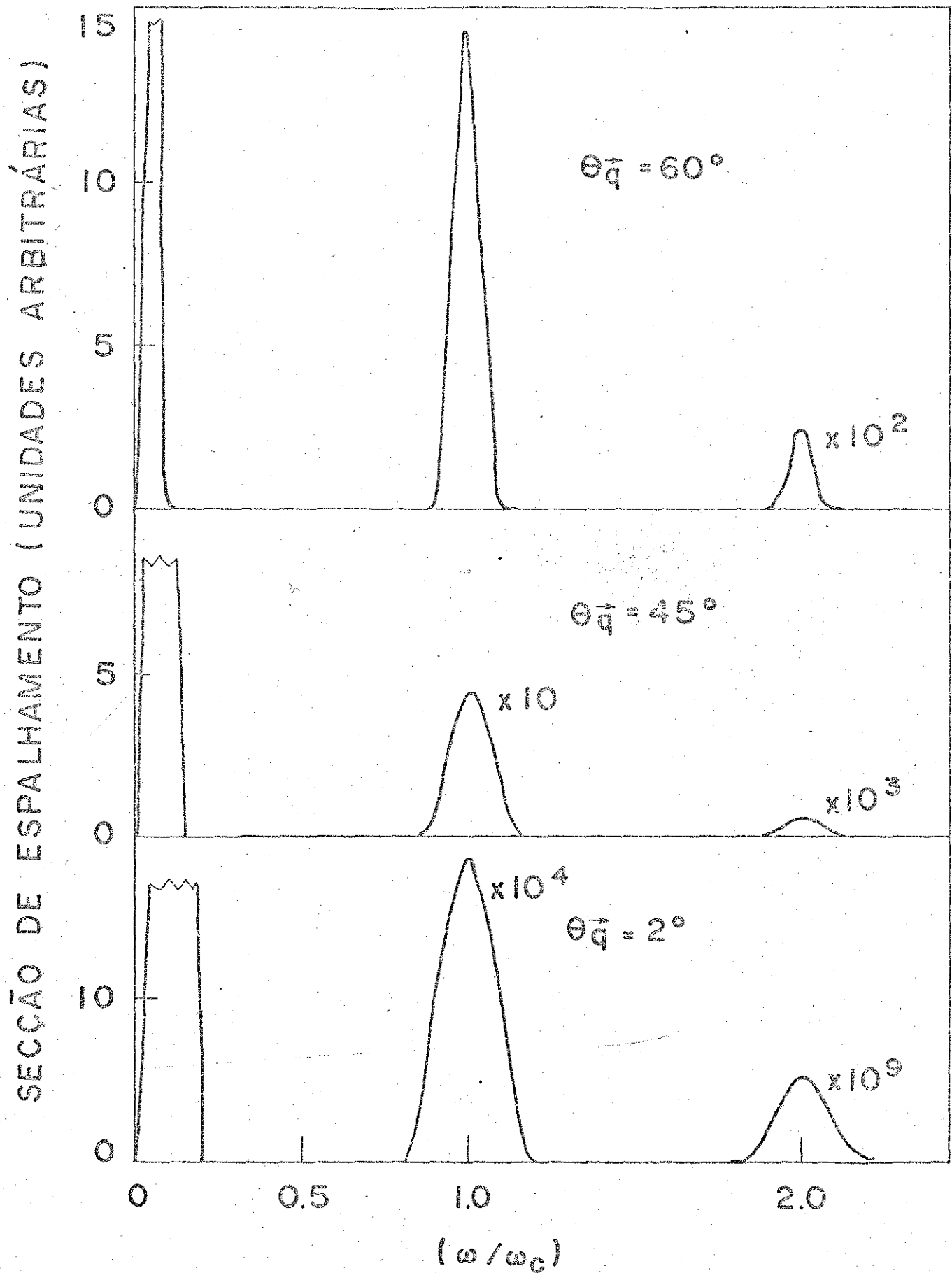
$$\begin{aligned} \left[\frac{d^2 \sigma}{d\omega d\Omega} \right]_0 &= r_0^2 (\vec{e}_L \cdot \vec{e}_S)^2 \frac{\omega_S}{\omega_L} \frac{\omega}{qv_F |\cos \theta_{\vec{q}}|} \times \\ &\times \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_m^2(\bar{g}) \theta \left(\frac{\omega + m\omega_c}{qv_F \cos \theta_{\vec{q}}} \right) \end{aligned} \quad (56)$$

A presença da função $\theta(x)$, na equação (56), nos mostra que o espectro consiste de linhas, centradas em múltiplos da frequência ciclotrônica. A largura destas linhas diminui à medida que o ângulo $\theta_{\vec{q}}$ aumenta (efetivamente torna-se uma função δ no caso estritamente perpendicular). Como estamos considerando o sistema em um regime sem colisão ($\omega_c \tau \rightarrow \infty$), o efeito Doppler é o responsável por esta largura de linha.

A figura (V-5) mostra um espectro típico de um gás degenerado não interagindo, para diferentes direções de propagação das excitações. Observamos que, para valores crescentes de $\theta_{\vec{q}}$, a intensidade das linhas aumentam. Este resultado era de se esperar pois, à medida que o ângulo $\theta_{\vec{q}}$ aumenta, a componente de \vec{q} perpendicular ao campo magnético, q_{\perp} , também aumenta, favorecendo transições entre órbitas ciclotrônicas.

Da equação (54), obtemos, para o caso degenerado, a seguinte expressão para $L_1(\vec{q}, \omega)$

$$L_1(\vec{q}, \omega) = \sum_m g_0 L_1(m) ,$$



. V-5. Espectro de um gas degenerado não interagindo em dife -
tes geometrias. Os resultados em torno de $\omega/\omega_c = 1$ foram mul-
ticados por 10^4 ou por 10^9 , 10^3 e 10^2 .

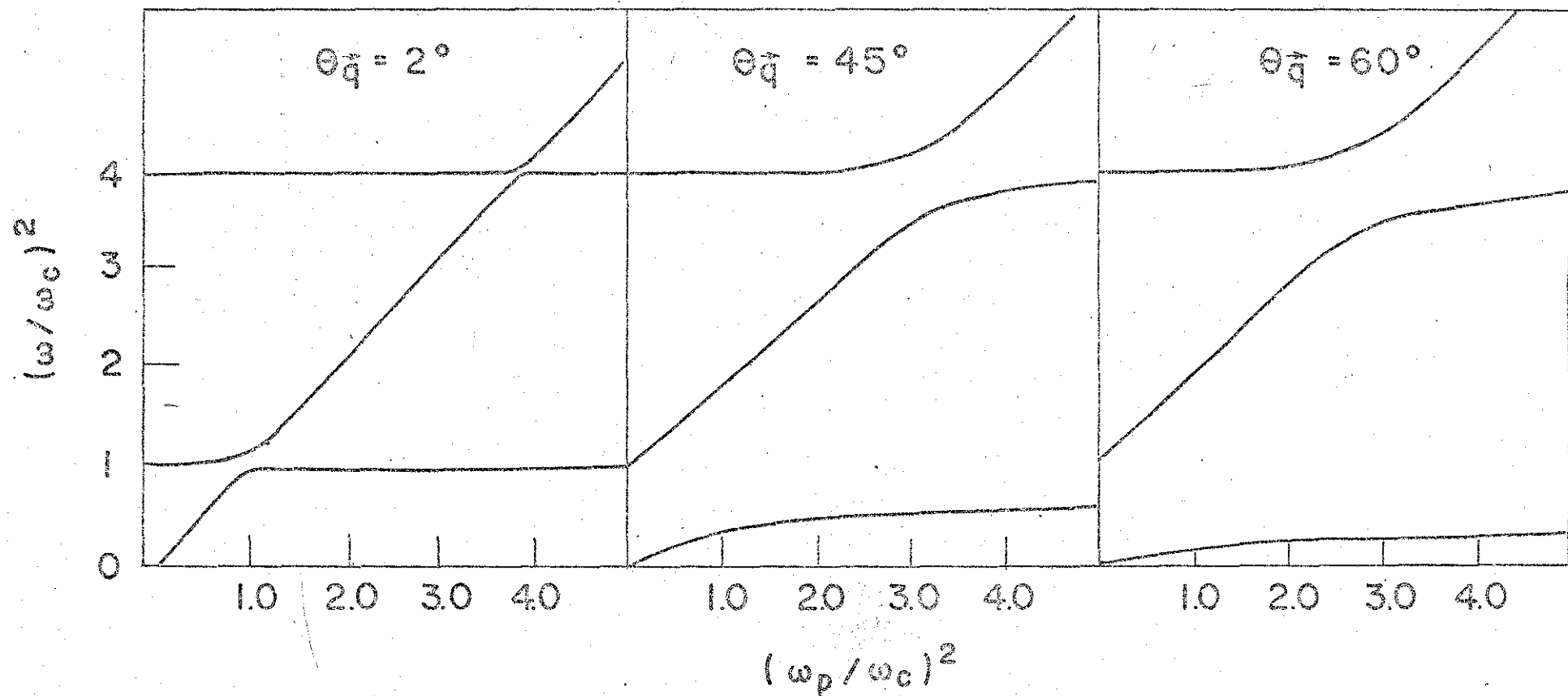


Fig. V-6. "Curva de dispersão" para um magnetoplasma degenerado
 $(qV_F/\omega_p = 0.26)$.

$$\begin{aligned}
L_1(m) = & \cos \theta \vec{q} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} a_{\ell m} b_{\ell m n} \left[\frac{q v_F \cos \theta \vec{q}}{\omega + m \omega_c} \right]^{n+1} \left[\frac{q v_F \sin \theta \vec{q}}{2 \omega_c} \right]^{2(\ell+m)} + \\
& + \frac{m \omega_c}{\omega + m \omega_c} \sum_{\ell=0}^{\infty} a_{\ell m} c_{\ell m} \left[\frac{q v_F \sin \theta \vec{q}}{2 \omega_c} \right]^{2(\ell+m)} + \\
& + \frac{m \omega_c}{\omega + m \omega_c} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{n=2}^{\infty} a_{\ell m} d_{\ell m n} \left[\frac{q v_F \cos \theta \vec{q}}{\omega + m \omega_c} \right]^n \left[\frac{q v_F \sin \theta \vec{q}}{2 \omega_c} \right]^{2(\ell+m)},
\end{aligned} \quad (57)$$

onde g_0 é a densidade de estados no nível de Fermi.

No limite de longos comprimentos de onda, retendo apenas contribuições até segunda ordem em (q/k_F) , a parte real da constante dielétrica torna-se

$$\begin{aligned}
\epsilon_1(\vec{q}, \omega) = & 1 - \left[\frac{\omega_p^2}{\omega^2} \cos^2 \theta + \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - \omega_c^2} \sin^2 \theta \right] + \\
& + \frac{3}{5} \frac{q^2 v_F^2 \omega_p^2}{\omega^4} \left\{ \sin^4 \theta \frac{1}{(1-4x^2)(1-x^2)} + \cos^4 \theta + \right. \\
& \left. + \sin^2 \theta \cos^2 \theta \left[\frac{1+x^2/3}{(1-x^2)^3} + \frac{1-x^2/3}{(1-x^2)^2} \right] \right\},
\end{aligned} \quad (58)$$

com $x = \omega_c/\omega$.

As soluções da equação $\epsilon_1(\vec{q}, \omega) = 0$, com ϵ_1 dado na equação (58) produzem as curvas de dispersão para as diferentes excitações do sistema. Algumas destas curvas estão desenhadas na figura V-6.

Em 1964, Mermin e Canel (18), estudando o comportamento de um plasma quântico em campo magnético uniforme, utilizando a representação de Landau, mostraram que a relação de dispersão para as excitações do sistema são dadas pelas raízes da equação

$$1 = \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \cos^2 \theta + \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - \omega_c^2} \sin^2 \theta + \frac{q^2 \omega_p^2}{m \omega^4} g\left(\frac{\omega_c}{\omega}, \theta \vec{q}\right) \quad (59)$$

onde

$$g(x, \theta) = 3W \sin^2 \theta \left[\cos^2 \theta \frac{1 - x^2/3}{(1-x^2)^2} + \sin^2 \theta \frac{1}{(1-4x^2)(1-x^2)} \right] + 6T_u \cos^2 \theta \left[\cos^2 \theta + \sin^2 \theta \frac{1+x^2/3}{(1-x^2)^3} \right] \quad (59a)$$

T_u e W são, respectivamente, a energia cinética média do movimento paralelo a \vec{B}_0 e a energia "potencial" associada ao movimento ciclotrônico, por partícula, em equilíbrio.

Comparando as equações (59) e (58) concluímos que, os nossos resultados concordam com os de Mermin e Canel, se identificarmos

$$T_u = \frac{1}{5} \epsilon_F$$

e

$$W = \frac{2}{5} \epsilon_F$$

onde ϵ_F é a energia de Fermi.

Observemos que o formalismo desenvolvido no trabalho de Mermin e Canel leva a uma dependência oscilante com B_0 , tanto de T_u quanto de W .

No processo que seguimos para resolver a equação de transporte, este tipo de dependência foi perdida quando passamos de uma soma sobre o espaço \vec{k} para uma integração sobre o contínuo conservando a mesma densidade de estados que havia na ausência de campo, isto é

$$\sum_{\vec{k}} \rightarrow \frac{V_0}{8\pi^3} \int d^3k \rightarrow \int \rho(\epsilon) d\epsilon$$

Este procedimento é válido desde que o campo magnético aplicado, não seja suficientemente alto, para que efeitos de quantização das órbitas sejam importantes, isto é, quando o espa

camento entre os níveis de Landau, ω_c , é pequeno comparado com a energia térmica, o que ocorre geralmente, a não ser para temperaturas muito baixas e campos magnéticos altos.

Efeitos oscilatórios são de difícil observação, e mesmo que sejam levados em conta em um formalismo mais rigoroso, introduzirão pequenas correções aos espectros calculados.

8.c - O gás não degenerado

Concentremos agora nossa atenção no regime de altas temperaturas e geometria experimental arbitrária.

A função $L_2(\vec{q}, \omega)$ será dada por

$$L_2(\vec{q}, \omega) = \frac{v_c}{8\pi^3} \frac{\pi A \beta \omega}{(q/m^*) \cos \theta_{\vec{q}}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{k_{\min}}^{\infty} dk k e^{-\beta k^2/2m^*} J_m^2(\bar{q}) \quad (60)$$

Introduzindo a mudança de variável

$$x = \frac{kq}{m^* \omega_c} \sin \theta_{\vec{q}} \left[1 - (k_{\min}/k)^2 \right]$$

a integral que aparece na equação (60) pode ser calculada através da relação (19)

$$\int_0^{\infty} x e^{-\rho^2 x^2} J_m^2(x) dx = \frac{1}{2\rho^2} e^{1/2\rho^2} I_m(1/2\rho^2) ,$$

onde I_m são as funções de Bessel de segunda espécie.

Depois de algumas manipulações algébricas, $L_2(\vec{q}, \omega)$ pode ser reescrita como

$$L_2(\vec{q}, \omega) = \frac{\beta n v}{\sqrt{\pi}} \frac{\omega}{q v_t |\cos \theta_{\vec{q}}|} e^{-\alpha^2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-\gamma^2} I_m(\alpha^2) \quad (61)$$

com

$$\alpha^2 = \frac{q^2 v_t^2}{2 \omega_c^2} \sin^2 \theta_{\vec{q}}$$

e

$$\gamma = \frac{\omega + m\omega_c}{qv_t \cos\theta_{\vec{q}}}$$

O espectro para um gás não-degenerado e não interagindo é então dado por

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega} \right)_0 = r_0^2 (\vec{e}_L \cdot \vec{e}_S)^2 \frac{\omega_s}{\omega_L} \frac{1}{qv_t \cos\theta_{\vec{q}}} e^{-\alpha^2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-\gamma^2} I_m(\alpha^2) \quad (62)$$

consistindo ainda de Vinhas centradas em torno de $\omega = \pm m\omega_c$ e de largura $L = qv_t \cos\theta_{\vec{q}}$. Um gráfico típico é mostrado na figura V-7 para os seguintes parâmetros numéricos: $\theta_{\vec{q}} = 60^\circ$, $\omega_p/\omega_c = 1$, $q/q_D = 0,28$.

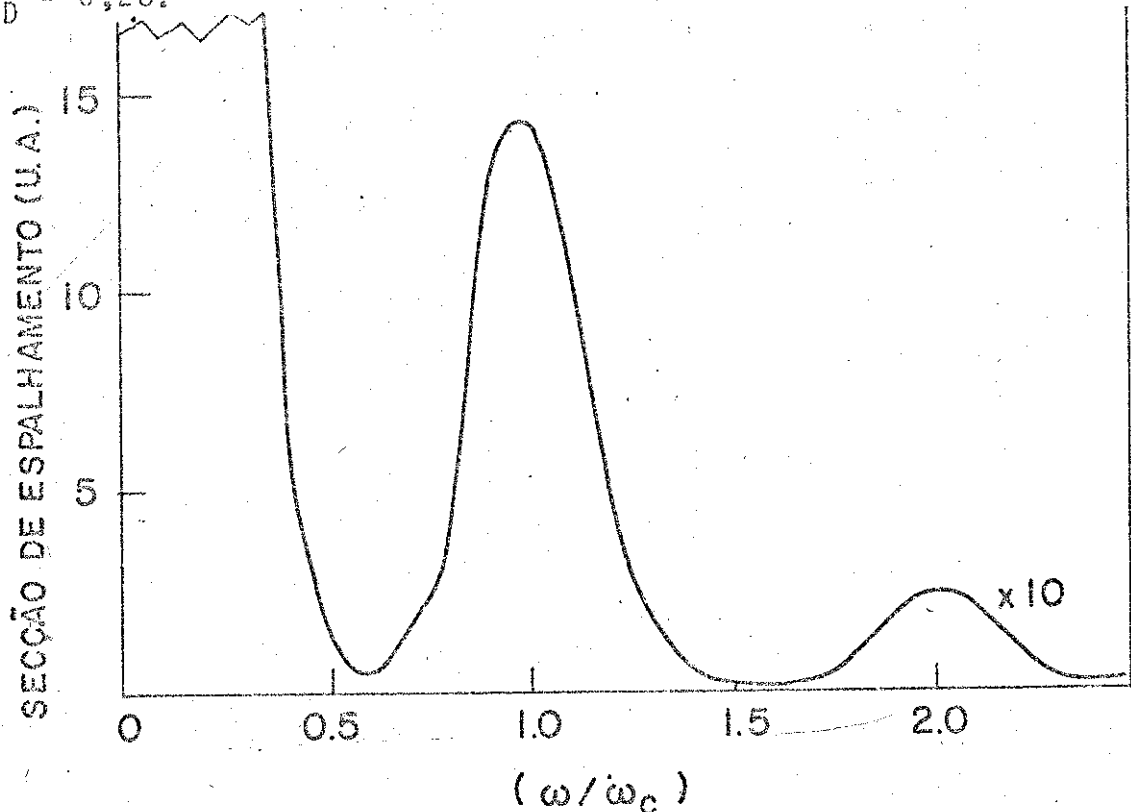


Fig. V.7 - Espectro de um gás não degenerado e não interagindo, para $\theta_{\vec{q}} = 60^\circ$, $\omega_p/\omega_c = 1$, $q/q_D = 0,28$. Os resultados em torno de $\omega/\omega_c = 2$ foram multiplicados por 10.

O cálculo da constante dielétrica, o qual é o que mostra como a interação coulombiana modifica o espectro do sistema livre, envolve o cálculo da função $L_1(\vec{q}, \omega)$.

Para valores de $\omega = \bar{m}\omega_c$, obtêm-se, da equação (52)

$$L_1(\bar{m}) = \frac{v_0}{2\pi^2} \frac{m^* \omega_c}{q \sin \theta_{\vec{q}}} A\beta \sum_{\ell=0}^{\infty} \int_0^{\infty} dk k^2 e^{-\beta k^2/2m^*} J_{2\ell+2\bar{m}+1}(2kq \sin \theta_{\vec{q}}/m^* \omega_c),$$

e realizando-se a integração em \vec{k} torna-se

$$L_1(\bar{m}) = \beta n v_0 e^{-\alpha^2} I_{\bar{m}}(\alpha^2) \quad .$$

Então para valores ressonantes podemos escrever a parte real da constante dielétrica como

$$\epsilon_1 = 1 + \frac{q_D^2}{q^2} e^{-\alpha^2} I_{\bar{m}}(\alpha^2) + W(q) \sum_{m \neq \bar{m}} L_1(m) \quad (63)$$

A equação (63), para a geometria paralela torna-se

$$\epsilon_1 = 1 + q_D^2/q^2 \quad ,$$

isto é, a já bem conhecida (20) expressão para a constante dielétrica estática na ausência de campo magnético.

Para valores não ressonantes o cálculo de L_1 pode ser feito através da equação (54).

Omitiremos a comprida expressão algébrica e nos restringiremos ao limite de longos comprimentos de onda, retendo apenas termos até a segunda ordem em (q/q_D) , para o qual a parte real da constante dielétrica torna-se

$$\epsilon_1 = 1 - \left[\frac{\omega_p^2}{\omega^2} \cos^2 \theta_{\vec{q}} + \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - \omega_c^2} \sin^2 \theta_{\vec{q}} \right] + \frac{3}{2} q^2 v_t^2 \frac{\omega_p^2}{\omega^4} \left[\cos^4 \theta_{\vec{q}} + \frac{\sin^4 \theta_{\vec{q}}}{(1-4x^2)(1-x^2)} + \right]$$

$$+ \sin^2 \theta_{\vec{q}} \cos^2 \theta_{\vec{q}} \left[\frac{1-x^2/3}{(1-x^2)^3} + \frac{1+x^2/3}{(1-x^2)^3} \right] \quad (64)$$

Identificando $W = 2T_n = k_B T$, o que está de acordo com o teorema de equipartição da energia, o resultado obtido na equação (64) concorda com o de Mermin e Canel (18).

As soluções de $\epsilon_1 = 0$, com ϵ_1 dado na equação (64), produzem as "curvas de dispersão" para as excitações do sistema em diferentes geometrias.

Observemos que, exceto para $\vec{q} \perp \vec{B}_0$, as linhas estão alargadas (devido ao amortecimento de Landau) e não temos verdadeiramente excitações elementares do sistema de muitos corpos.

Para $q = 0$, a equação $\epsilon_1 = 0$, tem como soluções os modos híbridos (2) de plasma e primeiro modo ciclotrônico, dados agora por

$$\omega_{\pm}^2 = \frac{1}{2} \left\{ (\omega_p^2 + \omega_c^2) \pm [(\omega_p^2 + \omega_c^2) - 4\omega_c^2 \omega_p^2 \cos^2 \theta_{\vec{q}}]^{1/2} \right\} \quad (65)$$

além do primeiro modo de Bernstein (15).

Para $\theta_{\vec{q}} = \pi/2$, da equação (65) obtemos

$$\omega_+^2 = \omega_p^2 + \omega_c^2$$

$$\omega_-^2 = 0.$$

Para $\theta_{\vec{q}} = 0$, os modos se desacoplam, dando

$$\omega_+^2 = \omega_c^2$$

$$\omega_-^2 = \omega_p^2$$

As soluções para estes dois casos limites estão desenhadas na figura V-8.

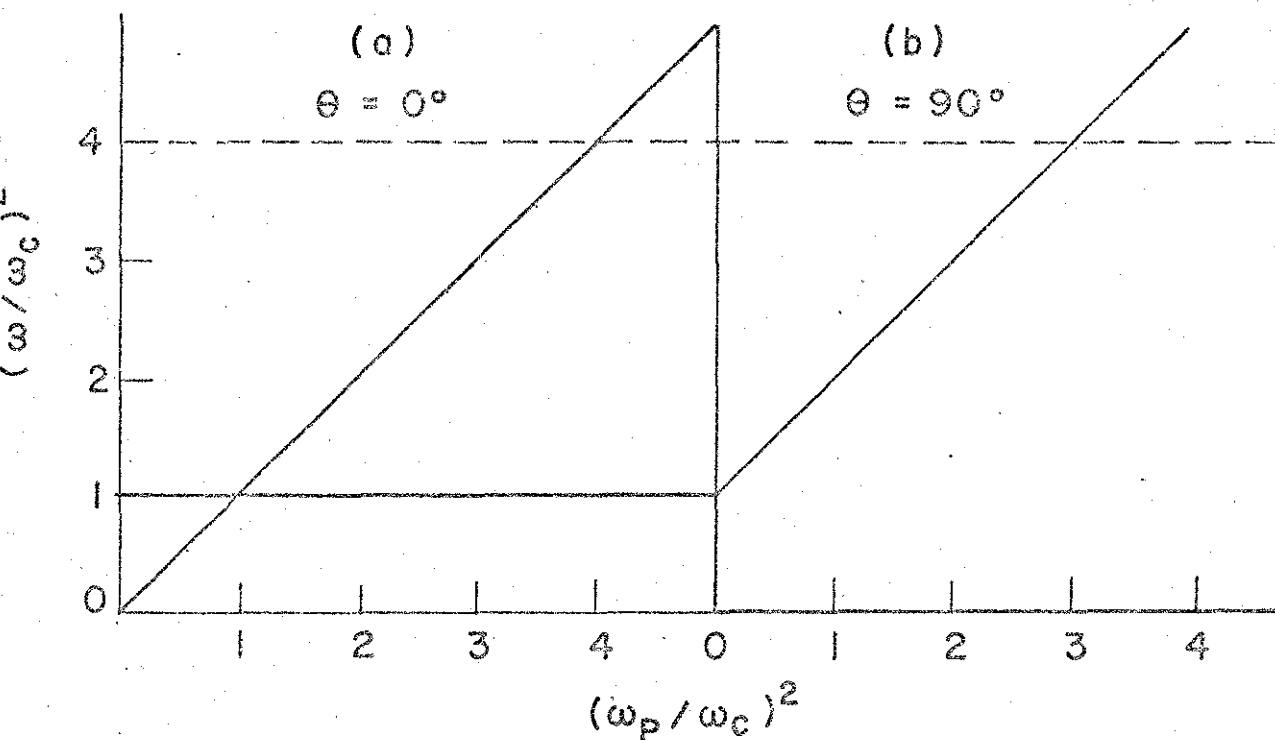


Fig. V.8 - Relação de dispersão para $q = 0$ nas geometrias paralelas e perpendiculares.

Para um valor finito de q , a equação $\epsilon_1(\vec{q}, \omega) = 0$ pode ser resolvida numericamente e o resultado para $q/q_D = 0,28$ está mostrado na figura V-9.

Para $\theta_{\vec{q}} = 2^\circ$, geometria quase paralela e $\theta_{\vec{q}} = 88^\circ$, geometria quase perpendicular, as curvas (a) e (d) assemelham-se às da figura V-8, porém agora, o momento transferido ao sistema é finito produzindo uma quebra da degenerescência.

O modo híbrido inferior praticamente desaparece na figura (d). À medida que o ângulo $\theta_{\vec{q}}$ diminui, ele torna-se cada vez mais pronunciado (figuras (c), (b), (a), tendendo ao primeiro modo ciclotrônico puro (figura (a)).

As separações das energias de excitação nas vizinhanças do cruzamento, pequenas na figura (a), aumentam com o aumento do ângulo $\theta_{\vec{q}}$ (figuras (b) (c) (d)). Estas observações indicam que o efeito do campo magnético se torna cada vez mais pronunciado à medida que o ângulo $\theta_{\vec{q}}$ aumenta isto é,

a medida que diminua a componente do momento transferido do sistema paralelo ao campo magnético.

Consideramos agora o espectro espalhado.

Das equações (37) e (38) a secção de espalhamento é escrita como

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega} = \frac{(d^2\sigma/d\omega d\Omega)_0}{|\epsilon(\vec{q}, \omega)|^2},$$

com $|\epsilon(\vec{q}, \omega)|^2 = \epsilon_1^2 + \epsilon_2^2$, sendo ϵ_1 dado pela equação (64) e $\epsilon_2 = W(\vec{q})L_2$.

Nas figuras V-10-11-12 mostramos o espectro do gás não degenerado, para um valor de $q = 0,28 q_D$, diferentes valores do campo magnético ($\omega_c/\omega_p = 2.0, 1.0, 0.53$) e diferentes geometrias ($\theta_{\vec{q}} = 2^\circ, 45^\circ, 60^\circ$).

Em todas as figuras, desenhamos para comparação, o espectro do gás não interagindo (linha cheia).

A figura V-10 mostra o espectro para uma geometria quase paralela, ($\theta_{\vec{q}} = 2^\circ$). Em (a) a intensidade espalhada está concentrada na linha com caráter de plasma ($\omega/\omega_c = 0,54$). Outras linhas de intensidade muito pequena aparecem centradas em $\omega/\omega_c = 1.01$ e $\omega/\omega_c = 2.00$ (estas linhas não estão desenhadas), o modo híbrido inferior é essencialmente plasma puro e o superior é o primeiro modo ciclotrônico. O primeiro modo de Bernstein também aparece puro. O campo magnético foi escolhido de tal modo que $\omega_c = 2\omega_p$.

Quando o campo magnético atinge intensidades tais que $\omega_c = \omega_p$, (figura (b)), o efeito de acoplamento de plasma e primeiro modo ciclotrônico dá lugar ao aparecimento dos modos híbridos. O Primeiro modo de Bernstein é puro.

Para um valor do campo magnético, tal que $\omega_c = 0,54\omega_p$

(figura c) vemos nitidamente a mistura do primeiro modo de Bernstein com o modo híbrido superior, sendo essencialmente este o mecanismo responsável pelo espalhamento.

As figuras V-11 e V-12 mostram o espectro Raman para as geometrias de 45° e 60° respectivamente. Em (a) os dois modos híbridos já estão presentes e o primeiro modo de Bernstein ainda não sofre efeitos de mistura. Em (c) a maior contribuição ao espalhamento é devido ao acoplamento entre o modo híbrido superior e o primeiro modo de Bernstein.

A posição dos diversos picos foi marcada nas curvas de dispersão da figura V-9 e podemos ver que estes valores concordam com as raízes de $\epsilon_1(\vec{q}, \omega) = 0$

9. Curvas de Dispersão para o GaAs

Curvas de dispersão para uma amostra de GaAs com concentrações $n = 1.4 \times 10^{17}/\text{cm}^3$ e $n = 6 \times 10^{16}/\text{cm}^3$ e valores de $q = 0,28 q_D$ e $q = 0.43 q_D$, nas geometrias de 45° e 88° são mostradas nas figuras V-13 e V-14.

A única tentativa experimental de medida dos modos híbridos, que seja do nosso conhecimento, foi feita por Patel e Slusher ⁽³⁾ para amostra de GaAs nas condições que especificamos. Entretanto, como se pode ver dos espectros da referência (3) o erro experimental é bastante grande impedindo qualquer confronto entre resultados teóricos e experimentais. Esperamos que, em um futuro próximo, o efeito venha a ser medido em nossos laboratórios.

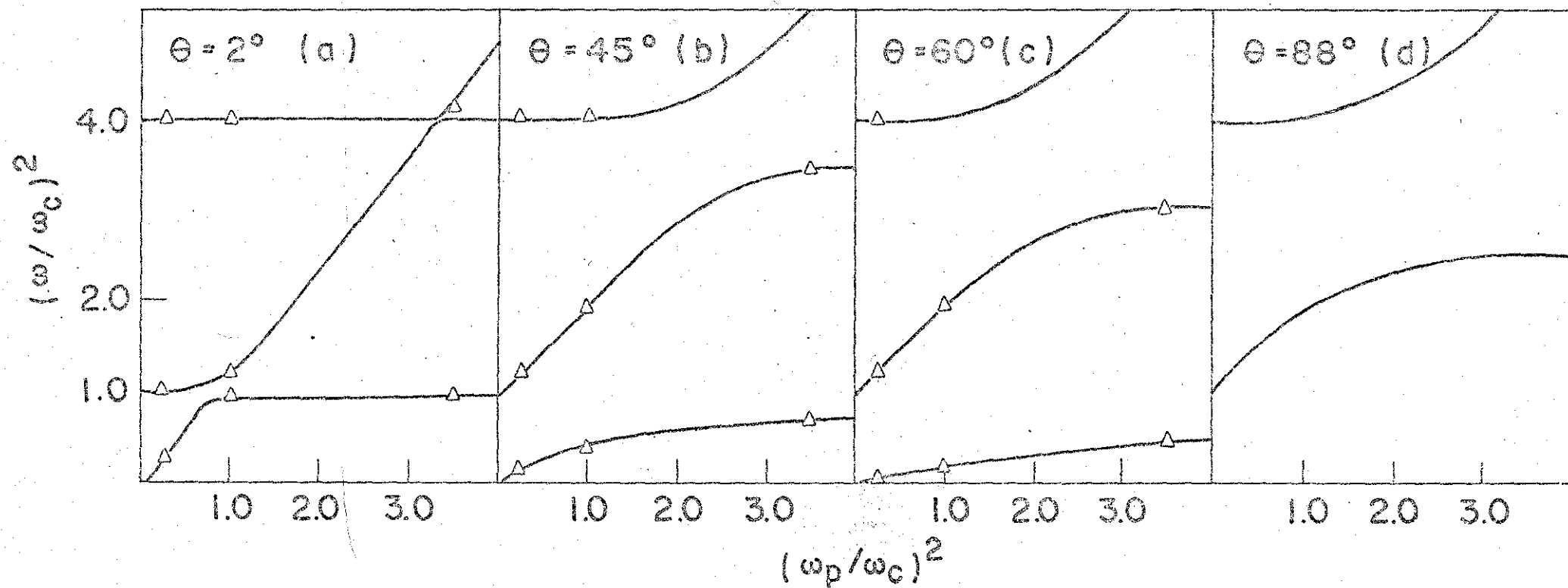


Fig. V-9. "Curvas de dispersão" para um gas não-degenerado com $q/q_D = 0.28$ e diferentes geometrias. Os triângulos representam as posições dos picos dos espectros desenhados nas figuras V-10, V-11 e V-12.

INTENSIDADE ESPALHADA (UNIDADES ARBITRÁRIAS)

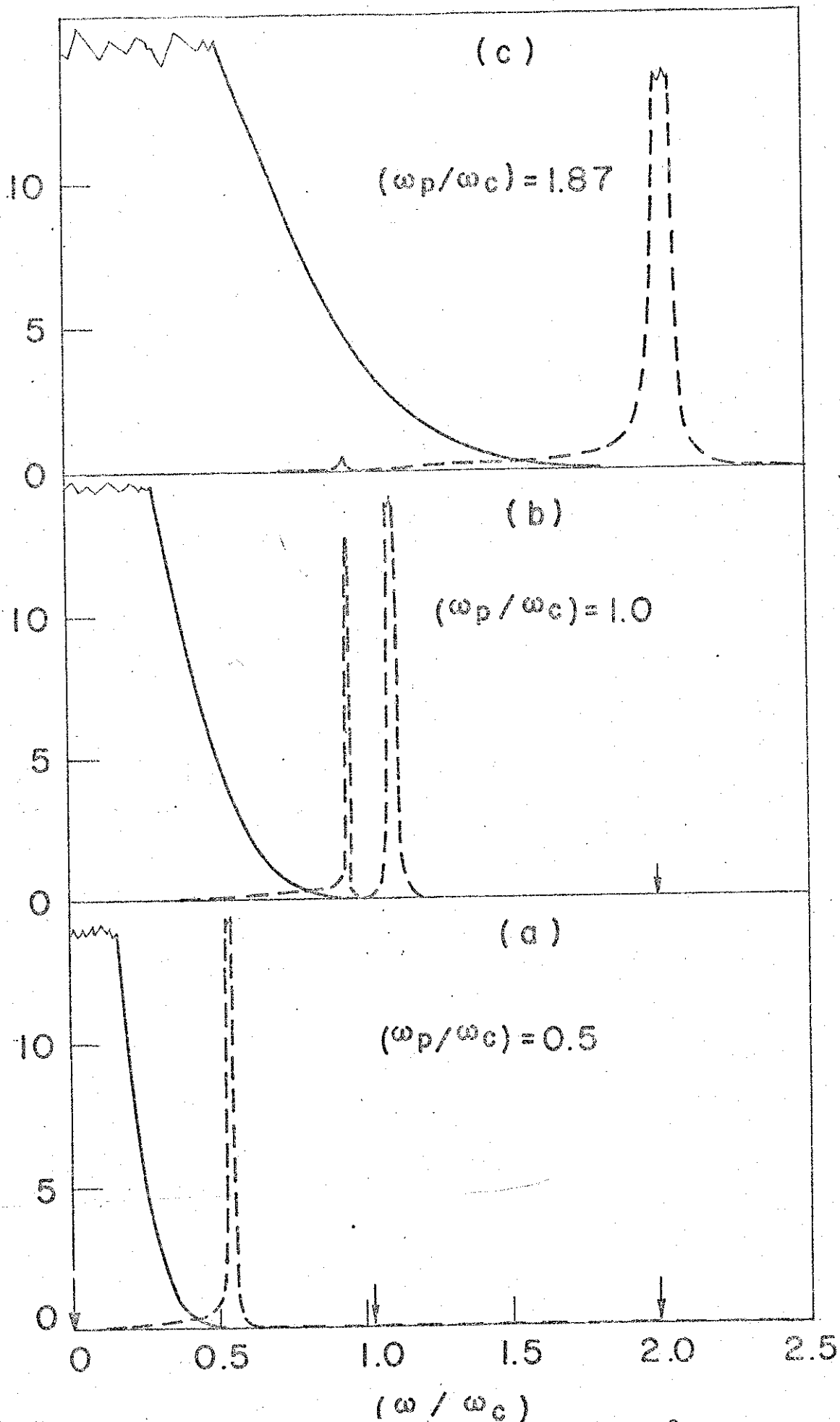


Fig. V-10. Espectro de um gas não degenerado para $\theta_{\vec{q}} = 2^\circ$, $q/q_D = 0.28$ em diferentes campos magnéticos. A linha cheia corresponde ao gas não interagindo. As setas indicam picos de pequena intensidade não desenhados.

INTENSIDADE ESPALHADA (UNIDADES ARBITRÁRIAS)

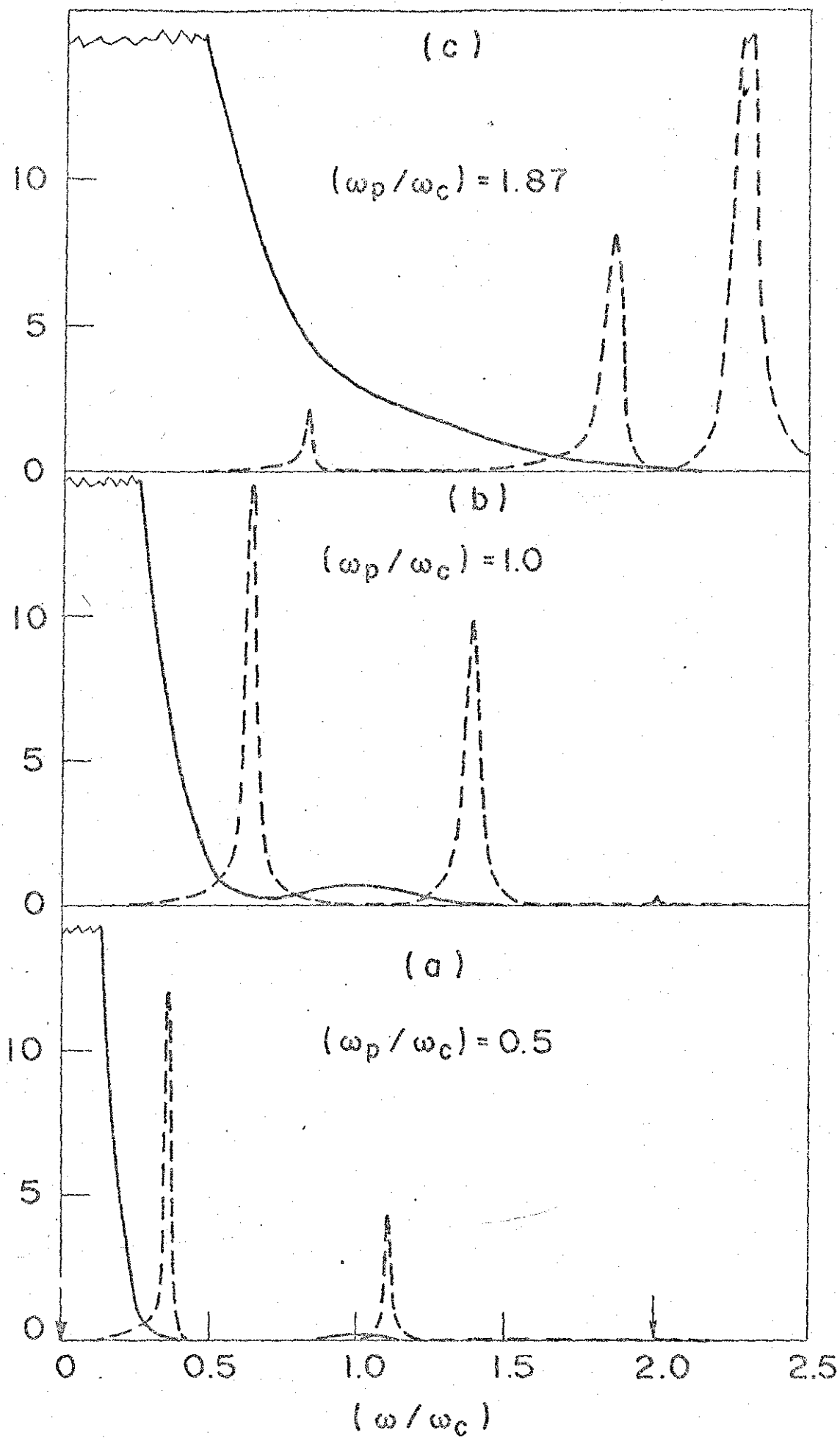


Fig. V-11. Idem Fig. V-10 com $\theta_q = 45^\circ$.

INTENSIDADE ESPALHADA (UNIDADES ARBITRÁRIAS)

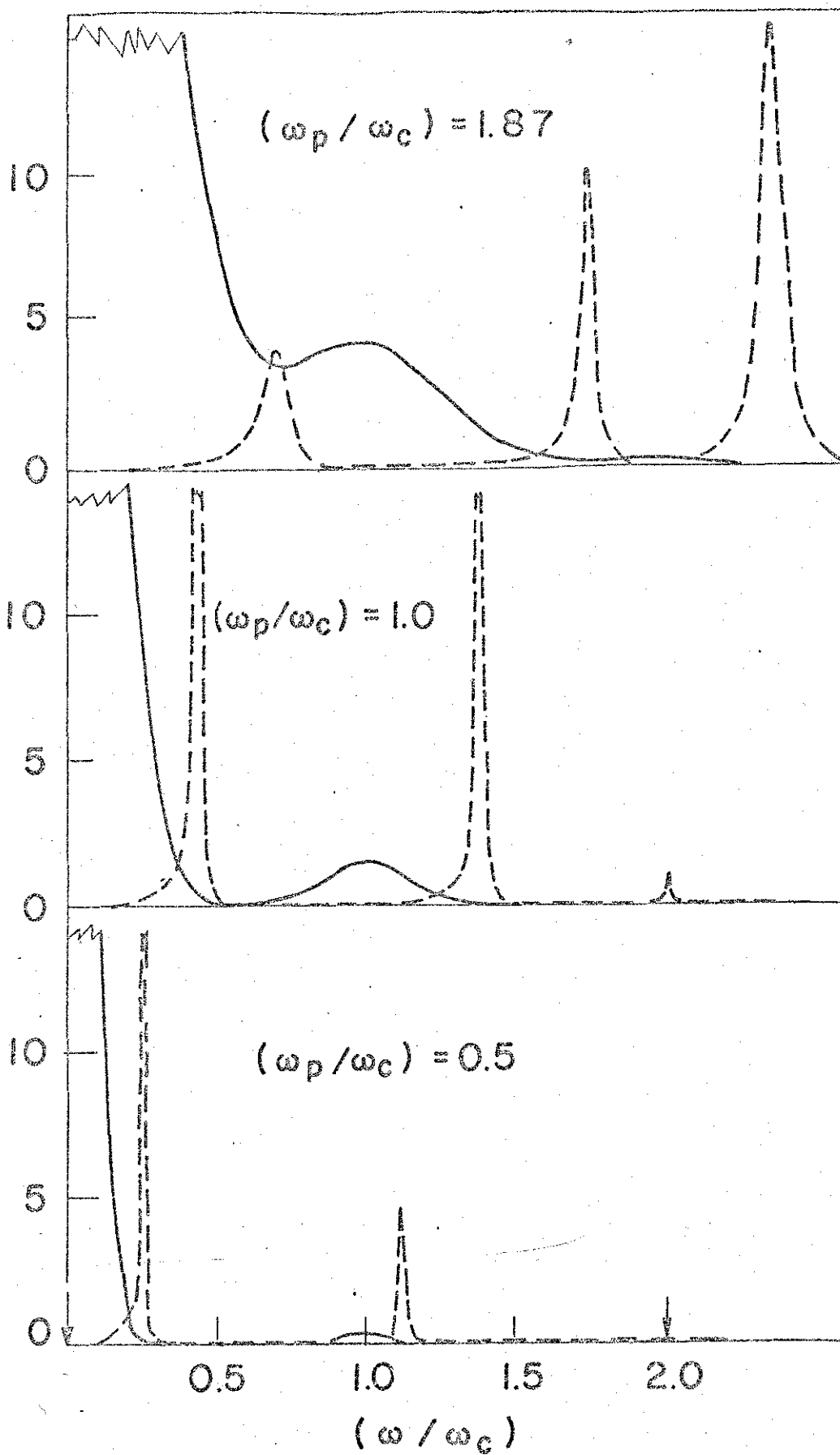


Fig. V-12. Idem Fig. V-10 com $\theta_q = 60^\circ$.

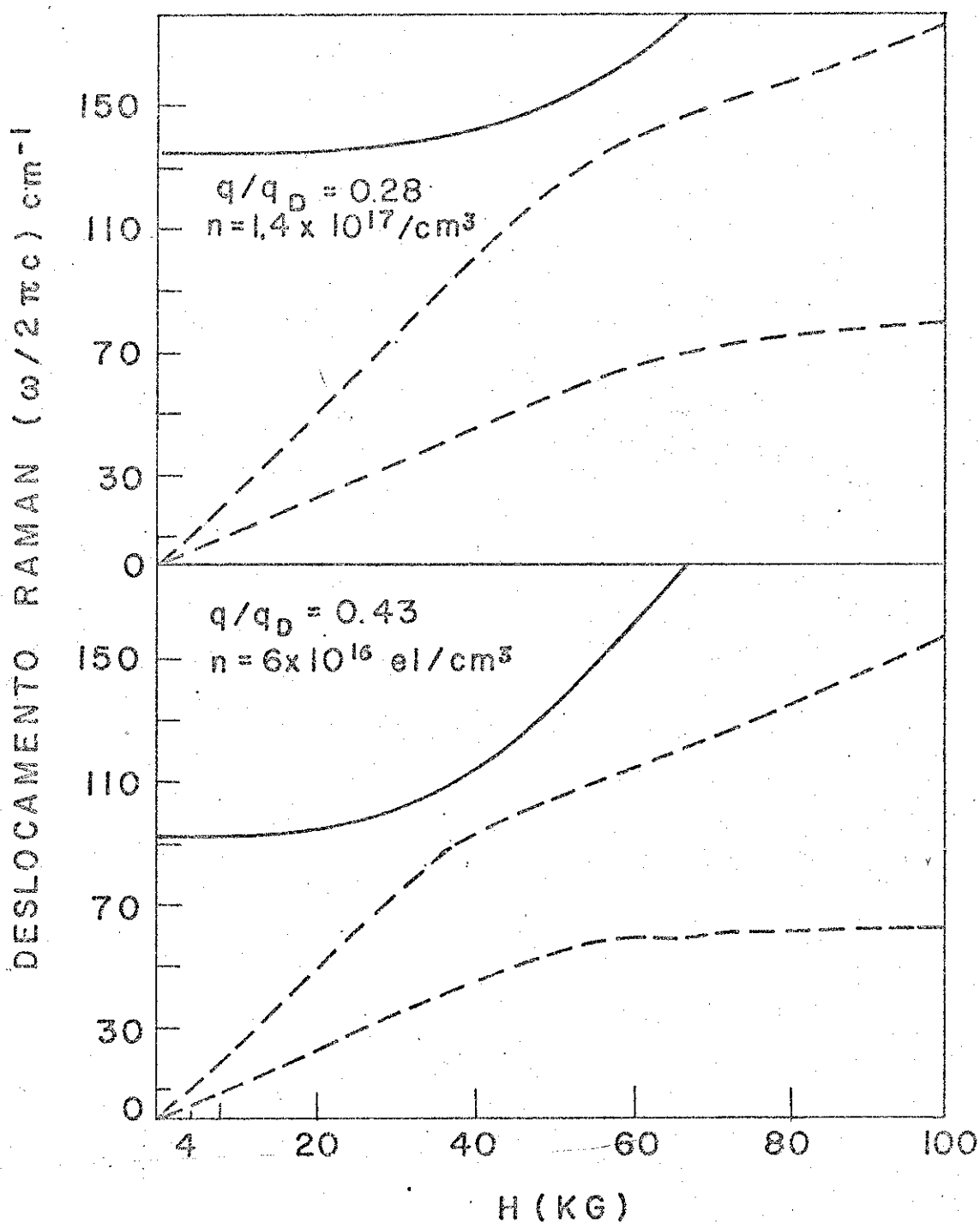


Fig. V-13. Curvas de dispersão para GaAs na geometria de 45° .

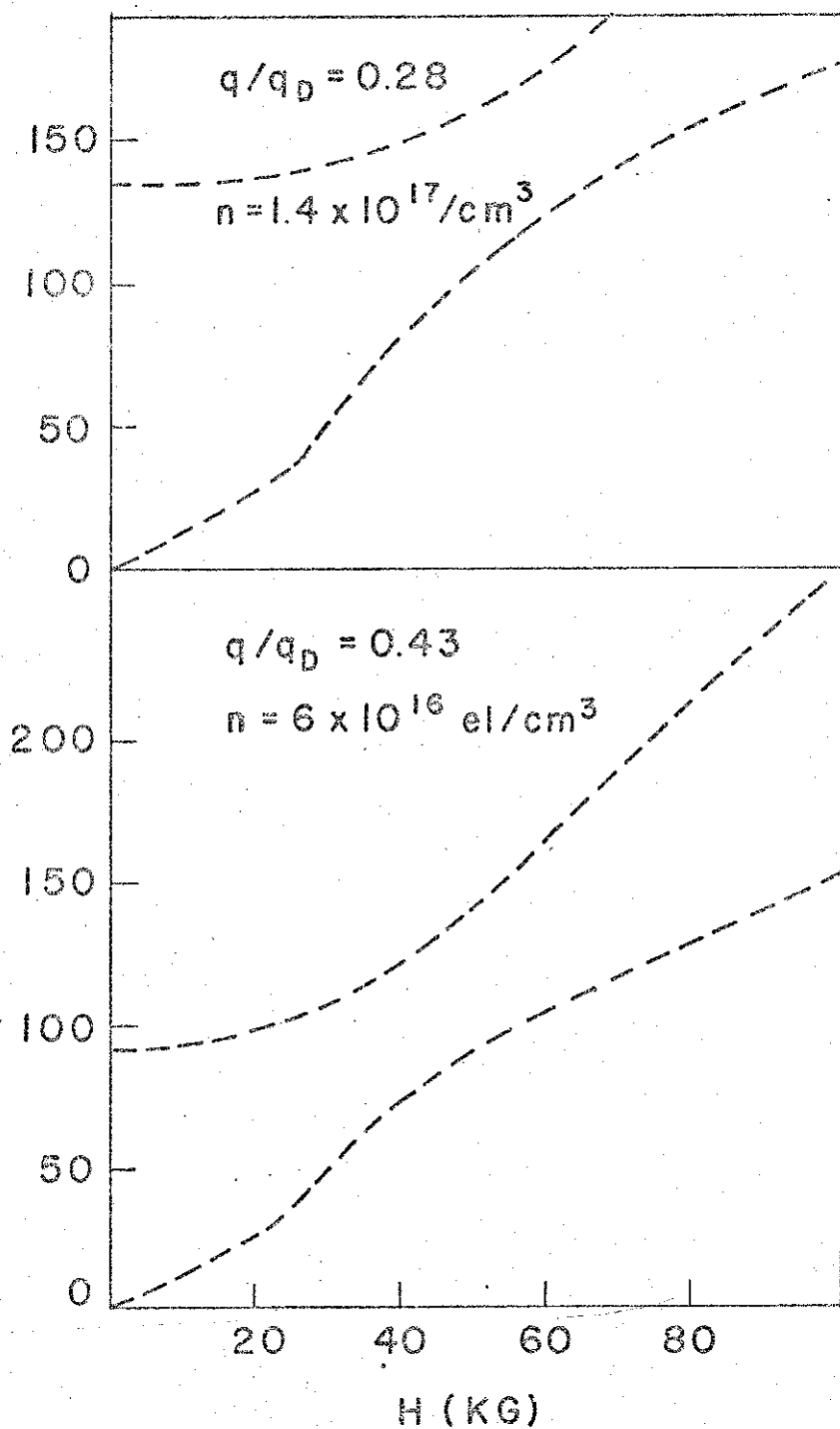


Fig. V-14. Curvas de dispersão para GaAs em uma geometria quase-perpendicular ($\theta_q = 88^\circ$).

10. Modificações, na intensidade das linhas, dependentes do campo magnético.

Essencialmente estudamos neste capítulo como os efeitos da interação coulombiana modificam o espectro do gás não interagindo.

Semicondutores não parabólicos (e.g. InSb) podem ser estudados com este formalismo, mas o tratamento matemático é bem mais laborioso.

Em 1966 Wolff ⁽¹⁰⁾ mostrou que para um semicondutor de banda não parabólica, o primeiro modo de Bernstein deve aparecer intenso no espectro e sua intensidade deve aumentar com o quadrado do campo magnético. Entretanto, medidas experimentais, em InSb ⁽⁵⁾ estão em franco desacordo com a teoria. Em vez da dependência quadrática prevista para a intensidade, observou-se que em 26 Kg a intensidade da linha correspondente ao primeiro modo de Bernstein era bem menor do que a 15 Kg, desaparecendo totalmente por volta de 30 Kg. Foi sugerido por Makarov ⁽²¹⁾ que estas discrepâncias poderiam ser explicadas como sendo o efeito da interação elétron-elétron negligenciada nos cálculos de Wolff ⁽¹⁰⁾.

O fator correlação elétron-elétron, $1/|\epsilon|^2$, desenhado na figura (V-15) mostra que se deve esperar uma forte atenuação do primeiro modo de Bernstein, para valores do campo magnético, tal que $\omega_c \sim \omega_p/2$ e a intensidade da linha tende ao valor do gás de elétrons livres quando ω_c aproxima-se de ω_p . Estes valores correspondem, para a amostra de InSb estudada na referência (5), aos campos magnéticos de 15 Kg e 30 Kg. Nossos cálculos sugerem que este comportamento, da intensidade da luz espalhada pelo primeiro modo de Bernstein, não explicado até hoje, seja o resultado da correlação coulombiana e efeitos de mistura, já que tanto no caso

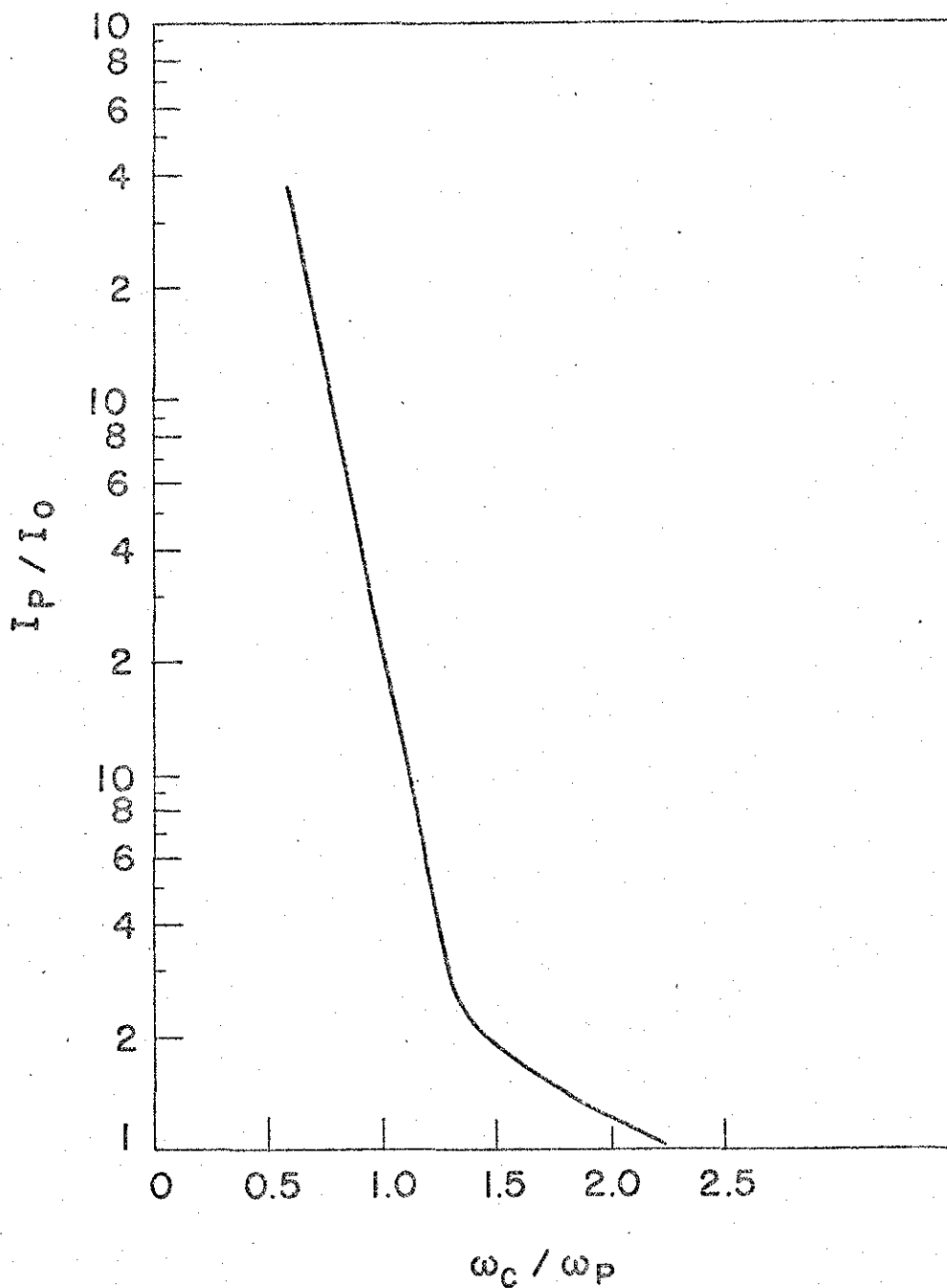


Fig. V-15. Intensidade, normalizada em relação ao gas não interagindo, do primeiro modo de Bernstein em função do campo magnético. Esta razão representa, essencialmente, os efeitos de interação coulombiana. O ângulo θ_c foi fixado em 45° .

parabólico, quanto no não parabólico, o coeficiente que afeta a secção de espalhamento do sistema de eletrons sem interação é o quadrado da resposta dielétrica, $\epsilon^{-1}(\vec{q}, \omega)$.

11. Conclusões

Estudamos, neste longo capítulo, o espalhamento Raman por excitações de magneto plasmas em semicondutores para uma geometria experimental arbitraria. Como já tinha sido feito no Capítulo IV, e pela mesma razão, foi dado ênfase especial ao plasma não degenerado em semicondutores com banda de condução parabólica. Mostramos o aparecimento da mistura do plasma com o primeiro modo ciclotrônico, os modos híbridos, e a mistura do modo híbrido superior com o primeiro modo de Bernstein. A dependência, destas misturas com a direção de propagação da excitação, foi estudada. Descrevemos também o espectro Raman.

De uma maneira geral nossos resultados nos permitem afirmar que: Na geometria paralela o plasma não é afetado pelo campo magnético e os fortes efeitos de blindagem do plasma livre devem estar presentes; na geometria perpendicular, nenhum efeito de atenuação ocorre e as linhas se tornam funções $\delta(\omega + m\omega_c)$, desaparecendo o amortecimento de Landau. Para valores intermediários de $\theta_{\vec{q}}$ o espectro consiste de linhas centradas em múltiplos da frequência ciclotrônica mas afetadas de uma certa largura, ,

$$L = \frac{qv_t}{\omega_c} \cos \theta_{\vec{q}},$$
 devido ao amortecimento de Landau. A interação eletrôn-eletron deslocará estas linhas para as raízes de $\epsilon_1(\vec{q}, \omega) = 0$ blindando o espalhamento por quase-partículas individuais. Estes resultados podem ser testados usando um arranjo experimental conveniente.

Comentário sobre a dependência da intensidade da li

nha Raman com o campo magnético devido a efeito de correlação encerra o capítulo.

ESPALHAMENTO MAGNETO-RAMAN POR FLUTUAÇÕES NA DENSIDADE DE SPIN

1. Introdução

No capítulo anterior, estudamos o espalhamento da luz por flutuações na densidade de carga em um magneto-plasma em semicondutor. Pretendemos agora completar este tipo de desenvolvimento estudando o espalhamento magneto-Raman com inversão na orientação do spin eletrônico (spin-flip) com aplicações numéricas ao GaAs. Este tipo de estudo dá informações sobre os momentos magnéticos renormalizados dos elétrons e sobre a constante de difusão, ambos dependentes do potencial de troca.

Espalhamento inelástico da luz pode ocorrer neste sistema como resultado de flutuações locais na densidade de spin. Tais flutuações envolvem excitações de partículas individuais assim como excitações coletivas. As últimas são as ondas de spin paramagnéticas preditas teoricamente por Silin⁽¹⁾ e detetadas experimentalmente por Schultz e Dunifer⁽²⁾ usando técnicas EPR. O principal mecanismo de espalhamento, um acoplamento indireto tipo dipolo elétrico foi predito por Yafet⁽³⁾. O problema tem despertado interesse em vários grupos experimentais.⁽⁴⁾

Calcularemos, neste capítulo, o espectro magneto-Raman com inversão na orientação de spin e discutiremos sua dependência com a geometria experimental, intensidade do campo magnético e temperatura. Incluiremos processos de colisão devido a impu

rezas e vibrações da rede. Disto resultará a difusão de spin, basicamente responsável pela forma de linha do espectro Raman das ondas de spin paramagnéticas. Estes processos de colisão assim como o tempo de relaxação de spin T_2 , serão tratados dentro da aproximação do tempo de relaxação de Boltzmann⁽⁵⁾.

2. A Secção de Espalhamento

Dentro do mesmo formalismo já desenvolvido nos capítulos IV e V a hamiltoniana de interação eletrón-radiação é dada pela equação (III-1) sendo o operador momento, da equação (IV-32) redefinido, de modo a incluir o campo \vec{B}_0 , substituindo-se \vec{p}_j por $\vec{p}_j + \frac{e}{c} \vec{A}_0(\vec{r}_j)$, sendo \vec{A}_0 o potencial vetor associado a \vec{B}_0 .

A secção de espalhamento esta dada na equação (V-2) e o potencial de espalhamento V , para processos com inversão na orientação de spin, na equação (IV-33).

3. A Flutuação na Densidade de Spin

A equação de movimento para a flutuação induzida na densidade de magnetização, $\rho(\vec{k}, \vec{q}, \omega)$ deduzida no capítulo II (equação 50), torna-se, supondo uma perturbação oscilante no tempo

$$[\omega - \epsilon_{\vec{k}} - \frac{1}{2} \epsilon_{\vec{q}+} + \epsilon_{\vec{k}+} \frac{1}{2} \epsilon_{\vec{q}+} + (ie/c)(\vec{v}_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} \times \vec{B}_0) \cdot \vec{v}_{\vec{k}}] \rho(\vec{k}, \vec{q}; \omega) =$$

$$\begin{aligned}
& - \left(n_{\vec{k}-\frac{1}{2}\vec{q}+} - n_{\vec{k}+\frac{1}{2}\vec{q}+} \right) (U/N) \sum_{\vec{k}'} \rho(\vec{k}', \vec{q}; \omega) = \\
& = \left(n_{\vec{k}-\frac{1}{2}\vec{q}+} - n_{\vec{k}+\frac{1}{2}\vec{q}+} \right) V + J_{col} \{ \rho \} ,
\end{aligned} \tag{1}$$

onde introduzimos as variáveis \vec{k} e \vec{q} definidas na equação (47-II), $V(\vec{k}, \vec{q})$ está dado na equação (IV - 33), o potencial de troca foi escrito como no capítulo IV e J_{col} é o operador de colisão, que escreveremos na aproximação de tempo de relaxação⁽⁵⁾ de Boltzmann, como

$$J_{col} \{ \rho \} = \frac{1}{\tau} \left[\rho(\vec{k}, \vec{q}; \omega) - \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}'} \rho(\vec{k}', \vec{q}; \omega) \right] + \frac{i}{T_2} \rho(\vec{k}, \vec{q}; \omega) \tag{2}$$

O primeiro termo na equação (2) envolve um tempo de relaxação orbital sem inversão de spin e o segundo representa colisões com inversão de spin.

Dentro do esquema da teoria do campo auto-consistente generalizado, para uma banda de condução parabólica, obtêm-se⁽⁶⁾ (ver apêndice D)

$$\epsilon_{\vec{k}+\frac{1}{2}\vec{q}+} - \epsilon_{\vec{k}-\frac{1}{2}\vec{q}+} = (\vec{k} \cdot \vec{q} / m^*) + \bar{\omega}_0 \tag{3}$$

onde

$$\tilde{\omega}_0 = g \mu_B B_0 / [1 - AU] \quad (4)$$

com $A = g_0$ (densidade de estados no nível de Fermi) para $T=0^\circ K$ e $A = 1/k_B T_e$ para um gas não degenerado à temperatura T_e , sendo k_B a constante de Boltzmann, g o fator giro-magnético, μ_B o magneton de Bohr e m^* a massa efetiva dos eletrons de condução.

Para resolver a equação (1), seguindo métodos padrões de solução da equação de Boltzmann⁽⁵⁾, faremos a seguinte substituição

$$\rho(\vec{k}, \vec{q}; \omega) = \psi_0(k, \vec{q}; \omega) + \vec{u} \cdot \vec{\psi}(k, q; \omega), \quad (5)$$

onde ψ_0 e $\vec{\psi}$ dependem somente do módulo de \vec{k} e $\vec{u} = \vec{k}/m^*$.

Substituindo a equação (5) na equação (1), esta última pode ser separada em uma equação par e em uma equação ímpar em \vec{k} . Então

$$\begin{aligned} (\omega - \tilde{\omega}_0 - \frac{i}{T_2}) \psi_0 - (\vec{u} \cdot \vec{q})(\vec{u} \cdot \vec{\psi}) + (ie/c)(\vec{u} \times \vec{B}_0) \cdot \nabla_{\vec{k}} \psi_0 - \\ - \tilde{\omega}_0 \frac{\partial n}{\partial \epsilon} (U/N) \sum_{\vec{k}'} \psi_0' = \tilde{\omega}_0 \frac{\partial n}{\partial \epsilon} v, \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned}
 & (\omega - \tilde{\omega}_0 - \frac{i}{\tau_2})(\vec{u} \cdot \vec{\psi}) - (\vec{u} \cdot \vec{q})\psi_0 + (ie/c)(\vec{u} \times \vec{B}_0) \cdot \nabla_{\vec{k}} (\vec{u} \cdot \vec{\psi}) + \\
 & + \tilde{\omega}_0 \frac{\partial n}{\partial \epsilon} (U/N)(\vec{u} \cdot \vec{q}) \sum_{\vec{k}'} \psi_0' = \tilde{\omega}_0 (\vec{u} \cdot \vec{q}) \frac{\partial n}{\partial \epsilon} V.
 \end{aligned}
 \tag{7}$$

uma vez que para bandas parabólicas e colisões elásticas a parte orbital da contribuição do operador de colisão à equação par \vec{e} é desprezível. Além disso escrevemos⁽⁷⁾

$$\tau_2^{-1} = \tau^{-1} + \tau_2^{-1}.$$

A suposição de ψ_0 e $\vec{\psi}$ serem funções somente do módulo de \vec{k} resulta em

$$(\vec{u} \times \vec{B}_0) \cdot \nabla_{\vec{k}} \psi_0 = 0,$$

e

$$(\vec{u} \times \vec{B}_0) \cdot \nabla_{\vec{k}} (\vec{u} \cdot \vec{\psi}) = - (\vec{B}_0 \times \vec{\psi}) \cdot \vec{u}.$$

As equações (6) e (7) tornam-se

$$\tilde{\omega} \psi_0 - (\vec{u} \cdot \vec{q})(\vec{u} \cdot \vec{\psi}) - \tilde{\omega}_0 \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \frac{U}{N} \sum_{\vec{k}'} \psi_0' = \tilde{\omega}_0 \frac{\partial n}{\partial \epsilon} V,$$

e

$$\tilde{\Omega} \vec{\psi} - \vec{q} \psi_0 - (i\omega_c/B_0) \vec{B}_0 \times \vec{\psi} + \vec{q} \tilde{\omega}_0 \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \frac{U}{N} \sum_{\vec{k}'} \psi_0' + \vec{q} \tilde{\omega}_0 \frac{\partial n}{\partial \epsilon} V = 0 \quad (9)$$

onde introduzimos

$$\tilde{\omega} = \omega_0 - \tilde{\omega}_0 - (i/\tau_2),$$

$$\tilde{\Omega} = \omega - \tilde{\omega}_0 - (i/\tau_2) = \Omega - (i/\tau_2),$$

e ω_c é a frequência ciclotrônica.

A equação (9), depois de algumas manipulações matemáticas torna-se

$$(\vec{u} \cdot \vec{q})(\vec{u} \cdot \vec{\psi}) = - [\tilde{\omega}_0 \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \frac{U}{N} \sum_{\vec{k}'} \psi_0' - \psi_0 + \tilde{\omega}_0 \frac{\partial n}{\partial \epsilon} V] G(\vec{k}, \vec{q}; \omega) \quad (10)$$

onde

$$G(\vec{k}, \vec{q}; \omega) = (\tilde{\Omega}^2 - \omega_c^2)^{-1} \tilde{\Omega} (\vec{u} \cdot \vec{q})^2 + (i\omega_c/B_0) [(\vec{B}_0 \times \vec{q}) \cdot \vec{u}] (\vec{u} \cdot \vec{q}) - (\omega_c^2/B_0^2 \tilde{\Omega}^2) (\vec{q} \cdot \vec{B}_0)(\vec{u} \cdot \vec{B}_0)(\vec{u} \cdot \vec{q}) \quad (11)$$

Substituindo a equação (10) na equação (8), obtemos

$$\psi_0 = - \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \frac{\tilde{\omega}_0 + G(\vec{k}, \vec{q}; \omega)}{\tilde{\omega} - G(\vec{k}, \vec{q}; \omega)} \left[\frac{U}{N} \sum_{\vec{k}'} \psi_0' - V \right] \quad (12)$$

A equação (12) é uma equação integral do mesmo tipo daquela encontrada no capítulo IV e sua solução é dada por :

$$\psi_0 = \frac{(U/N)F(\vec{k}, \vec{q}, \omega) \sum_{\vec{k}'} F(\vec{k}', \vec{q}, \omega) V(\vec{k}', \vec{q}) + F(\vec{k}, \vec{q}) V(\vec{k}, \vec{q}) - (U/N)F(\vec{q}) F(\vec{k}, \vec{q}) V(\vec{k}, \vec{q})}{1 - (U/N) F(\vec{q}, \omega)} \quad (13)$$

onde

$$F(\vec{k}, \vec{q}; \omega) = - \frac{\partial n}{\partial \epsilon} (\tilde{\omega}_0 + G)/(\tilde{\omega} - G) \quad (14)$$

e

$$F(\vec{q}, \omega) = \sum_{\vec{k}} F(\vec{k}, \vec{q}; \omega) \quad (15)$$

Apenas o conhecimento de $\psi_0(\vec{k}')$ é necessário para o cálculo da secção de espalhamento uma vez que estamos supondo $V(\vec{k}, \vec{q})$ uma função par de \vec{k} .

4. A Susceptibilidade de Spin

Aproximando o elemento de matriz do potencial pelo valor médio constante, dado na equação (40-IV) a secção de espalhamento torna-se

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega} = \frac{V_0^2 \omega_s^2}{(2\pi)^3 c^4} (n_\omega + 1) \frac{1}{\pi} \text{Im } \chi(\vec{q}, \omega), \quad (16)$$

onde

$$\chi(\vec{q}, \Omega) = \frac{F(\vec{q}, \Omega)}{1 - \frac{U}{N} F(\vec{q}, \Omega)} \quad (17)$$

é a susceptibilidade de spin.

Se consideramos apenas termos até a segunda ordem em q a função $F(\vec{q}, \Omega)$ será escrita como

$$F(\vec{q}, \Omega) \approx \frac{\omega_0}{\tilde{\omega}} \sum_{\vec{k}} \left(-\frac{\partial n}{\partial \epsilon} \right) + \left(1 + \frac{\omega_0}{\tilde{\omega}} \right) \frac{1}{\tilde{\omega}} \sum_{\vec{k}} \left(-\frac{\partial n}{\partial \epsilon} \right) G(\vec{k}, \vec{q}, \Omega). \quad (18)$$

Substituindo em (18) a expressão de $G(\vec{k}, \vec{q}, \Omega)$ obtemos, após realizar as integrações nas variáveis θ e ψ

$$F(\vec{q}, \Omega) = \frac{\tilde{\omega}_0}{\tilde{\omega}} \left(\frac{v_0}{2\pi^2} \right) \int_0^\infty \left(-\frac{\partial n}{\partial \epsilon} \right) k^2 dk +$$

$$+ \left(1 + \frac{\omega_0}{\tilde{\omega}}\right) \frac{\tilde{\Omega}}{\tilde{\omega}} \frac{1}{3} \frac{q^2}{m^*} \left(\frac{v_0}{2\pi^2}\right) \int_0^\infty \left(-\frac{\partial n}{\partial \epsilon}\right) k^4 dk \times$$

$$\times \left[\frac{\sin^2 \theta_{\vec{q}}}{\tilde{\Omega}^2 - \omega_c^2} + \frac{\cos^2 \theta_{\vec{q}}}{\tilde{\Omega}^2} \right] \quad , \quad (19)$$

onde $\theta_{\vec{q}}$ é o ângulo que o vetor q forma com o campo magnético \vec{B}_0 .

Para $T = 0^\circ K$ a função $F(\vec{q}, \tilde{\Omega})$ será dada por

$$F(\vec{q}, \Omega) = g_0 \frac{\tilde{\omega}_0}{\omega_0} + \frac{\tilde{\omega} + \tilde{\omega}_0}{\tilde{\omega}} g_0 \frac{q^2 v_F^2}{3} \frac{\tilde{\Omega}}{\tilde{\omega}} \left[\frac{\sin^2 \theta_{\vec{q}}}{\tilde{\Omega}^2 - \omega_c^2} + \frac{\cos^2 \theta_{\vec{q}}}{\tilde{\Omega}^2} \right] \quad , \quad (20)$$

onde g_0 é a densidade de estados no nível de Fermi.

Substituindo o resultado (20) na expressão para a susceptibilidade de spin reobtemos os resultados da literatura⁽⁸⁾.

Para altas temperaturas ($T \gg T_F$), a distribuição torna-se maxwelliana e a função $F(\vec{q}, \tilde{\Omega})$ será dada por

$$F = nA \frac{\tilde{\omega}_0}{\tilde{\omega}} + \left(1 + \frac{\tilde{\omega}_0}{\tilde{\omega}}\right) nBq^2 \frac{\tilde{\Omega}}{\tilde{\omega}} \left[\frac{\sin^2 \theta}{\tilde{\Omega}^2 - \omega_c^2} + \frac{\cos^2 \theta}{\tilde{\Omega}^2} \right] \quad , \quad (21)$$

$$A = 1/K_B T_e \quad B = v_{ti}^2 / 2k_B T_e$$

Finalmente a secção de espalhamento por ondas de spin paramagnéticas torna-se

$$\frac{d^2 \sigma}{d\Omega d\omega} = \frac{v_0^2 \omega_s^2}{(2\pi)^3 c^4} v^2 [1 - e^{-\beta\omega}]^{-1} A \tilde{\omega}_0 \times$$

$$\times \frac{T_2^{-1} + Dq^2}{(\omega - \omega_0 - Cq^2)^2 + (T_2^{-1} + Dq^2)^2}, \quad (22)$$

onde

$$C(\omega) = - \frac{B}{A} (1 - UA) \Omega \left[\frac{\cos^2 \theta}{\Omega^2 + (1/\tau_2)^2} + \frac{(\tilde{\omega}^2 - \omega_c^2 + 1/\tau_2^2) \sin^2 \theta}{[(\Omega - \omega_c)^2 + 1/\tau_2^2] [(\Omega + \omega_c)^2 + 1/\tau_2^2]} \right], \quad (23)$$

e

$$D(\omega) = \frac{B}{A} (1 - UA) \frac{1}{\tau_2} \left[\frac{\cos^2 \theta}{\Omega^2 + (1/\tau_2)^2} + \frac{(\tilde{\omega}^2 + \omega_c^2 + 1/\tau_2^2) \sin^2 \theta}{[(\Omega - \omega_c)^2 + 1/\tau_2^2] [(\Omega + \omega_c)^2 + (1/\tau_2^2)]} \right] \quad (24)$$

onde A foi definido depois da equação (4) e

$$B = \begin{cases} g_0 v_F^2/3 & \text{em } T_e = 0^\circ K \\ v_t^2/2k_B T_e & \text{em } T_e \gg T_F \end{cases}$$

O coeficiente C está relacionado com a relação de dispersão para as ondas de spin paramagnéticas, e o coeficiente D é a constante de difusão (9) de spin.

O espectro espalhado terá uma forma quase lorentziana (a dependência de C e D com a frequência é muito pequena em torno da posição do pico), com uma largura

$$r(\vec{q}) = T_2^{-1} + Dq^2 \quad (25)$$

Este resultado foi confirmado experimentalmente por Scott et al.⁽⁴⁾ em CdS.

A linha Raman está centrada aproximadamente nas frequências das ondas de spin.

$$\omega = \omega_0 - (B/A)q^2 - \frac{\omega_0}{\omega_0^2} \frac{\omega_c^2 \cos^2 \theta - U^2 A^2 \omega_0^2}{\omega_c^2 - U^2 A^2 \omega_0^2} \quad (26)$$

Esta "relação de dispersão" é mostrada na figura VI-1 para vários valores do ângulo θ_q e para o conjunto de parâmetros apropriados ao Ga As, $m^* = 0.07$, $g = 0.58$, $U = 17$ meV para $n = 1.7 \times 10^{17} / \text{cm}^3$. O valor de 17 meV para U é o mesmo usado no Capítulo IV.

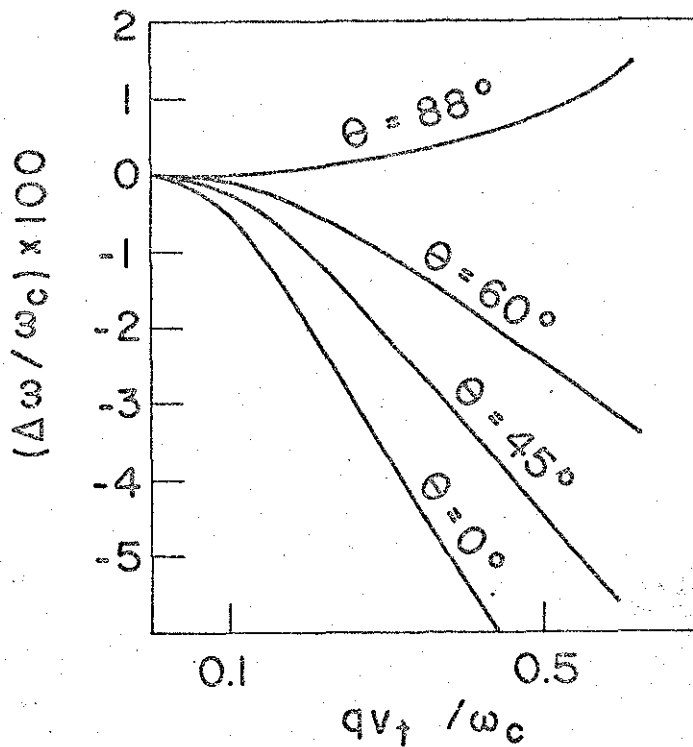


Fig.VI-1. Comportamento das ondas de spin em diferente geometrias. Os parâmetros numéricos estão indicados no texto.

Consideraremos a seguir o coeficiente de difusão de spin.

5. O Coeficiente de Difusão de Spin

Para discutir o coeficiente de difusão de spin, D , precisamos especificar melhor o tempo de relaxação τ_2 . Admitindo $\tau \ll T_2$, obtem-se $\tau_2 \approx \tau$. Escrevendo ainda, de acordo com a regra de Mathiessen⁽⁷⁾

$$\tau^{-1} = \tau_{\text{imp}}^{-1} + \tau_f^{-1} \quad ,$$

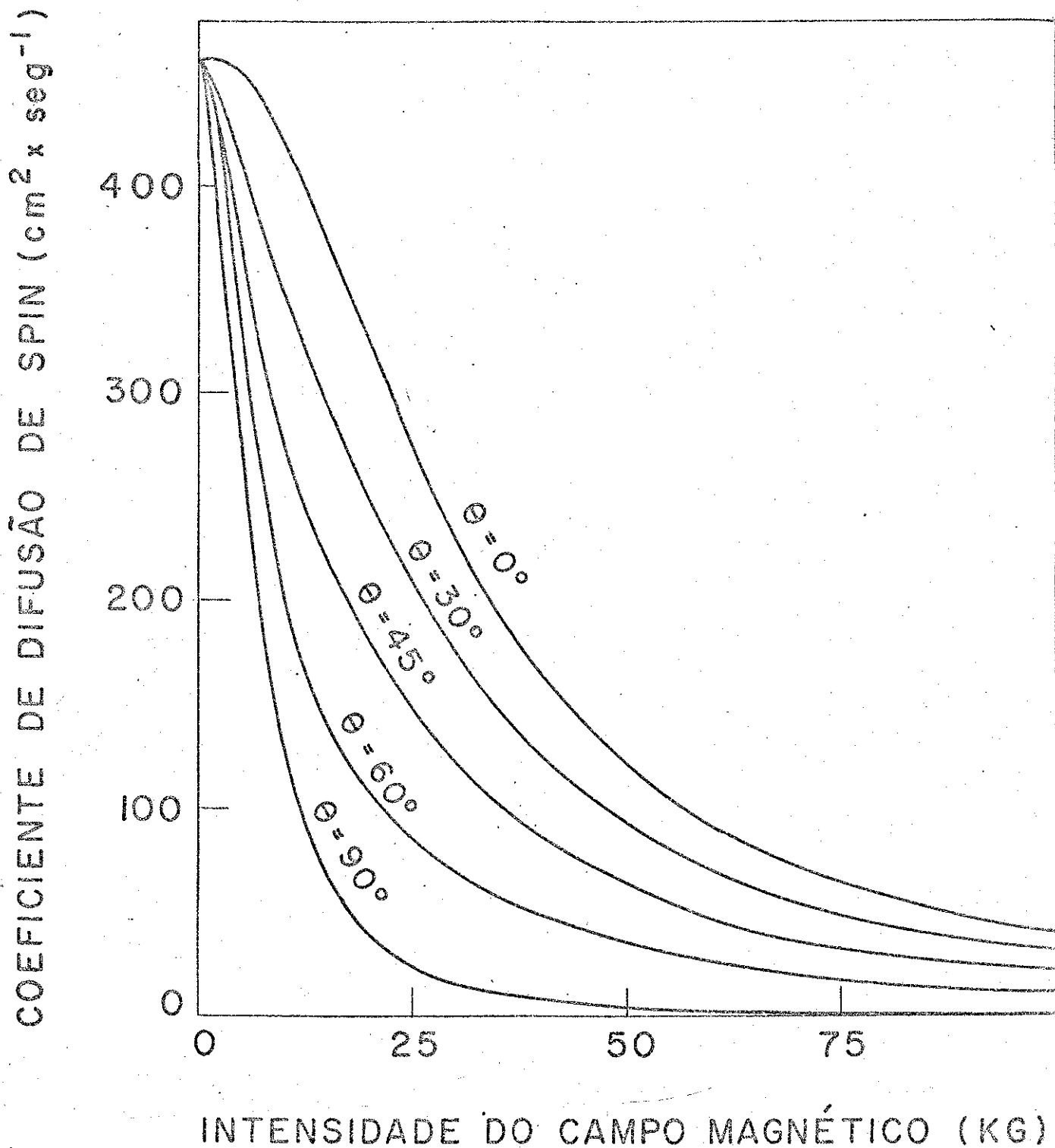


Fig. VI-2. Coeficiente de difusão de spin em função do campo magnético. Os outros parâmetros numéricos estão indicados no texto.

onde τ_{imp} e τ_f são as contribuições devidas ao espalhamento por impurezas e pelas vibrações da rede, respectivamente. Esta última é dominante para o gas não degenerado.⁽¹⁰⁾

Para o gas de eletrons em condições de quase-equilíbrio sendo T_e a temperatura efetiva, o tempo de relaxação τ_f ⁽¹¹⁾ pode ser facilmente generalizado para obter em condições de quase-equilíbrio

$$\frac{\tau_f}{\tau_f^0} = \left[\frac{T_0}{T_e} \right]^{1/2} \frac{T_0}{T_L},$$

onde τ_f^0 é o valor de τ_f na temperatura de equilíbrio T_0 e T_L a temperatura da rede. De medidas de mobilidade em Ga As a temperatura de 290°K obtem-se⁽¹²⁾

$$\tau_f = 1.5 \times 10^{-11} \sqrt{T_e} \text{ s.}$$

Com este resultado calculamos o coeficiente de difusão de spin da equação (24) para Ga As em $\omega = \omega_0$ como função da intensidade do campo magnético e para diferentes direções de propagação da onda de spin. Este resultado está mostrado na Figura VI-2, onde vemos que o valor de D diminui para campos magnéticos crescentes. Este resultado era de se esperar uma vez que aumentar o campo magnético implica em diminuir o raio ciclotrônico em relação ao caminho livre médio tornando menos efetivo o espalhamento por colisões. Observemos que, na ausência de campo magnético o coeficiente de difusão reduz-se ao valor usual da teoria ci

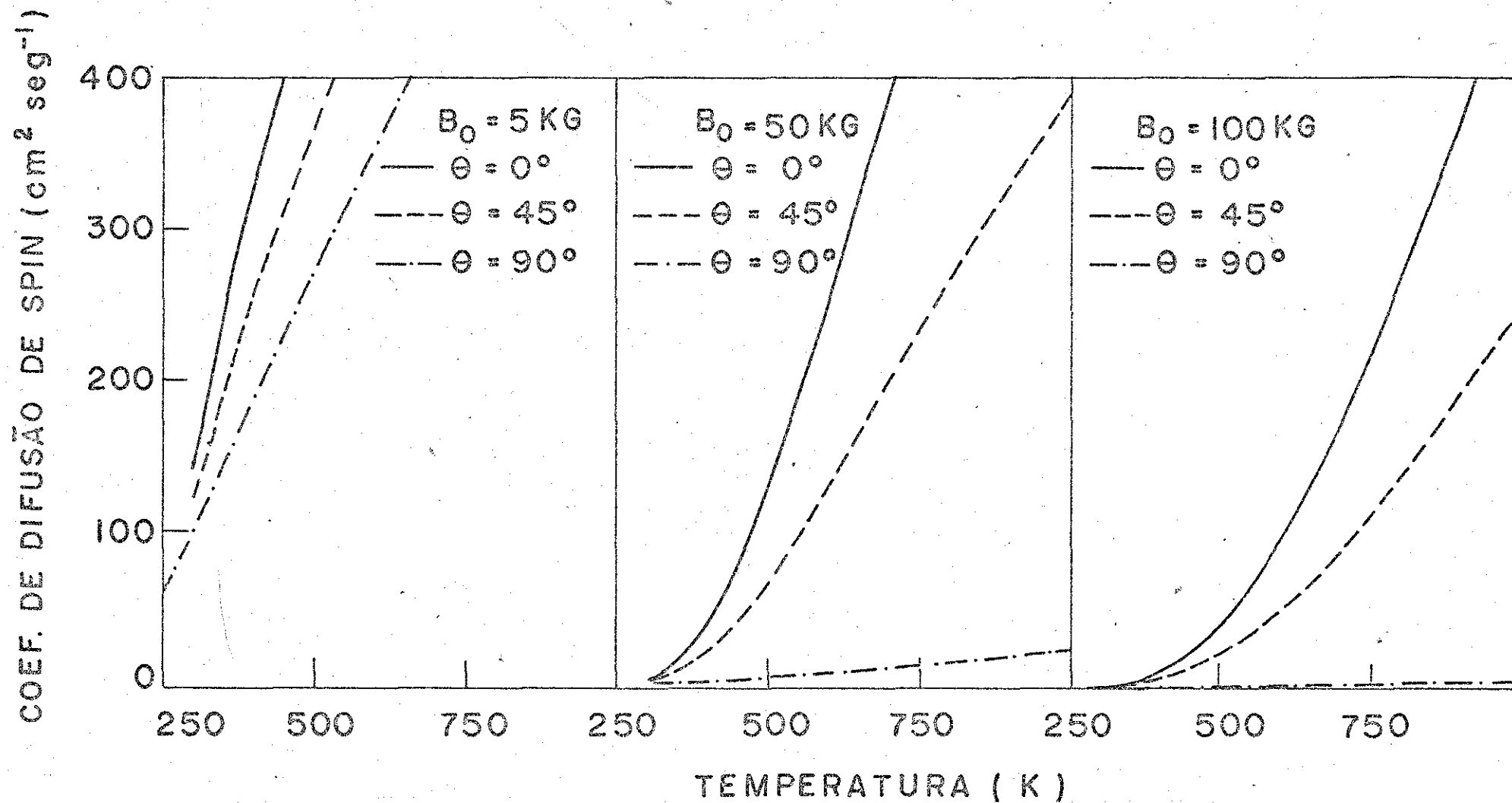


Fig. VI-3. Coeficiente de difusão de spin em função da temperatura efetiva dos eletrons. Os outros parâmetros numéricos estão indicados no texto.

nética dos gases $(9) \frac{\tau v_t^2}{2}$.

Na figura VI-3 mostramos $D(\omega_0)$ para o Ga As como função da temperatura efetiva dos eletrons, T_e , em diferentes valores de B_0 e do ângulo θ_q . O coeficiente de difusão depende da temperatura efetiva principalmente através de v_t e τ e disto resulta um aumento de D em função de T_e .

6. O Espalhamento Raman por Ondas de Spin Paramagnéticas

O espectro Raman devido ao espalhamento por ondas de spin paramagnéticas em Ga As dopado pode ser calculado com os resultados da secção anterior. Que seja do nosso conhecimento, nenhuma determinação experimental do tempo de relaxação T_2 foi feita para o Ga As, até a presente data. Admitindo valores típicos de 10^{-12} a 10^{-11} seg (4) e para um valor de $q = 10^5 \text{ cm}^{-1}$ em um campo magnético de 50 kG, sendo o sistema eletrônico descrito por uma temperatura efetiva $T_e = 500^\circ \text{K}$, obtemos $Dq^2 \gg \frac{1}{T_2}$, indicando que, nestas condições, é a difusão de spin, quem governa a largura de linha do espectro Raman mostrado na figura VI-4. A secção de espalhamento integrada é da ordem de 10^{-25} cm^2 dentro das possibilidades de observação com as técnicas experimentais usuais.

7. Espalhamento por Excitações Individuais na Geometria Paralela.

Até agora consideramos o sistema em condições tais que o espalhamento Raman por ondas de spin paramagnéticas é dominante (13) , isto é para valores do número de onda q , transferido ao

SECÇÃO DE ESPALHAMENTO (U.A.)

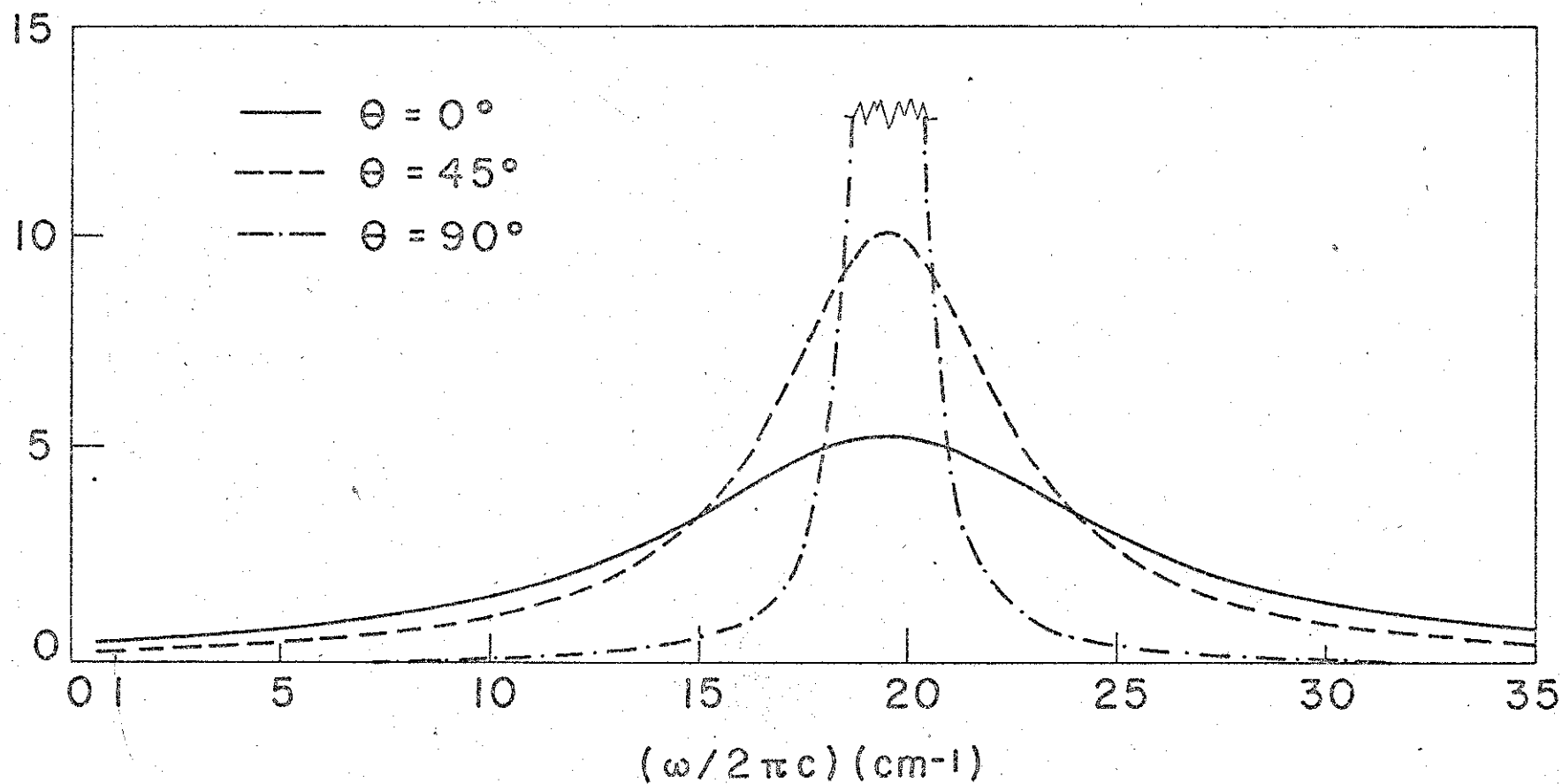


Fig. VI-4. Espectro Raman por ondas de spin paramagnéticas em diferentes geometrias.

sistema no evento de espalhamento, menores que o valor crítico q_c ou seja quando as ondas de spin são modos de excitação bem definidos, (ver Fig. VI-5). Para $q > q_c$ as ondas de spin são fortemente amortecidas decaindo no contínuo de Stoner⁽¹³⁾.

Focalizaremos agora a nossa atenção ao espalhamento por processos de inversão na orientação de spin das quase-partículas individuais. O problema pode ser resolvido de uma maneira geral, seguindo o desenvolvimento do capítulo V. Entretanto, se nos restringirmos ao caso de \vec{q} paralelo a \vec{B}_0 e $\omega_0 \tau_2 \gg 1$ o problema matemático reduz-se a forma mais simplificada desenvolvida no Capítulo IV.

Neste caso, a função $G(\vec{k}, \vec{q}, \omega)$, definida na equação (11) será escrita como

$$G(\vec{k}, \vec{q}, \omega) = \frac{1}{\tilde{\omega}} \frac{q^2 k^2}{m^{*2}} \cos^2 \theta$$

e a função $F(\vec{q}, \omega)$, introduzida na equação (15) torna-se :

$$F(\vec{q}, \omega) = \frac{V_0}{8\pi^2} \cdot 2\pi \cdot \int_0^\infty dk \, k^2 \left(-\frac{\partial n}{\partial \epsilon} \right) \int_0^\pi d\theta \sin\theta \frac{\tilde{\omega}\tilde{\omega}_0 + (q^2 k^2 / m^{*2}) \cos^2 \theta}{\tilde{\omega}^2 - \frac{q^2 k^2}{m^{*2}} \cos^2 \theta}$$

ou integrando na variável θ

$$F(\vec{q}, \omega) = \frac{V_0}{4\pi^2} \int_0^\infty dk \, k^2 \left(-\frac{\partial n}{\partial \epsilon} \right) \left[\left[\omega / (kq/m^*) \right] \ln \left| \frac{\tilde{\omega} + kq/m^*}{\tilde{\omega} - kq/m^*} \right|^{-2} \right] +$$

$$+\frac{v_0}{4\pi^2} i \pi \int_0^\infty dk k^2 \left(\frac{m^* \omega}{kq} \right) \left(-\frac{\partial n}{\partial \varepsilon} \right), \quad (27)$$

$$\frac{m^* \tilde{\omega}}{q}$$

7.a. 0 Gas Degenerado

A temperatura $T = 0^\circ K$, a equação (27) pode ser integrada facilmente obtendo-se

$$F(\vec{q}, \omega) = g_0 \left\{ n \ln \left| \frac{\tilde{n} + 1}{\tilde{n} - 1} \right| - 2 \right\} +$$

$$+ i \pi g_0 n \Theta(\tilde{n} - 1), \quad (28)$$

onde $\eta = \omega / qv_F$, $\tilde{\eta} = \frac{\omega - \tilde{\omega}_0}{qv_F}$, g_0 é a densidade de estados no nível de Fermi, Θ é a função degrau. O espectro consiste agora de duas contribuições distintas. Para valores de ω , que pertençam ao intervalo

$$\tilde{\omega}_0 - qv_F < \omega < \tilde{\omega}_0 + qv_F,$$

o espalhamento é essencialmente devido a variações no spin de cada quase-partícula individualmente.

Para valores de ω fora deste intervalo a resposta do sistema envolverá uma superposição coerente de mudança de spin de cada partícula, as ondas de spin.

A relação de dispersão para estas ondas de spin é dada pelas raízes da equação $1 + \frac{V}{N} F_1(\vec{q}, \omega) = 0$, sendo F_1 a parte real da função F . Para valores pequenos de q , o logaritmo na equação (28), pode ser expandido de modo a obter :

$$\omega = \omega_0 \left\{ 1 - \frac{1}{3} \frac{q^2 v_F^2}{\tilde{\omega}_0^2} \right\} \quad (29)$$

coincidindo com o resultado da referência (1).

Um gráfico típico das curvas de dispersão das ondas de spin está esboçado na Fig. VI-5. A região hachureada é o chamado contínuo de Stoner. A curva indica também o valor de q (q_c) que delimita as regiões de respostas coletivas e individuais, isto é, para valores de $q > q_c$ as ondas de spin se dissolvem no contínuo de Stoner.⁽¹³⁾

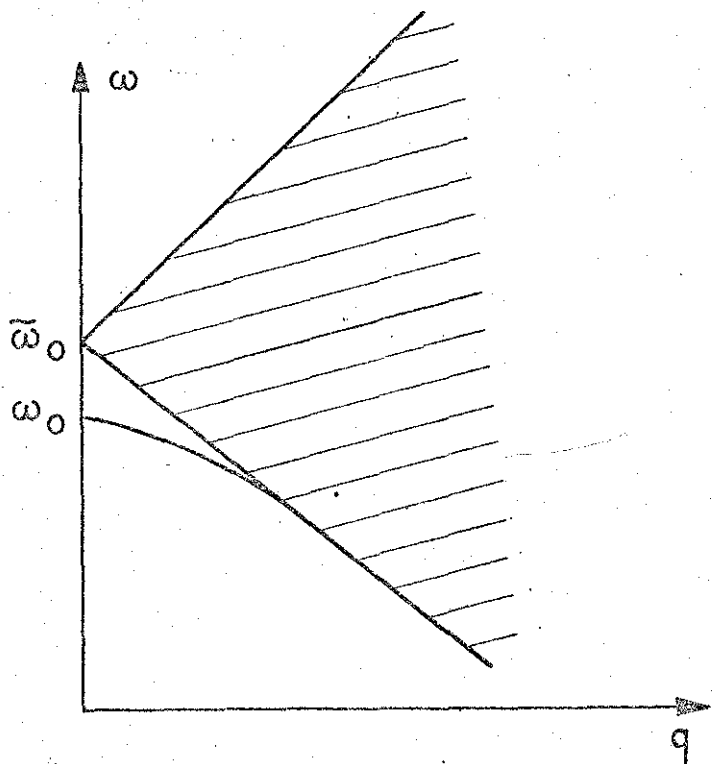


Fig. VI - 5. "Curva de dispersão" para as ondas de spin no caso de propagação paralela ao campo.

Na figura (VI-6) mostramos um espectro típico para um gas degenerado na geometria paralela e submetido a um campo externo de 10 KG. O valor de u_{g_0} foi escolhido como 0.58 para uma amostra com concentração $n = 10^{17}$ ele/cm³. O espectro tem um polo em $\omega_0/qv_F = 8.4$ ($q = 10^5$ cm⁻¹) e apresenta uma forma de linha de largura $L = 2qv_F$ em torno de $\frac{\tilde{\omega}_0}{qv_F} = 20$.

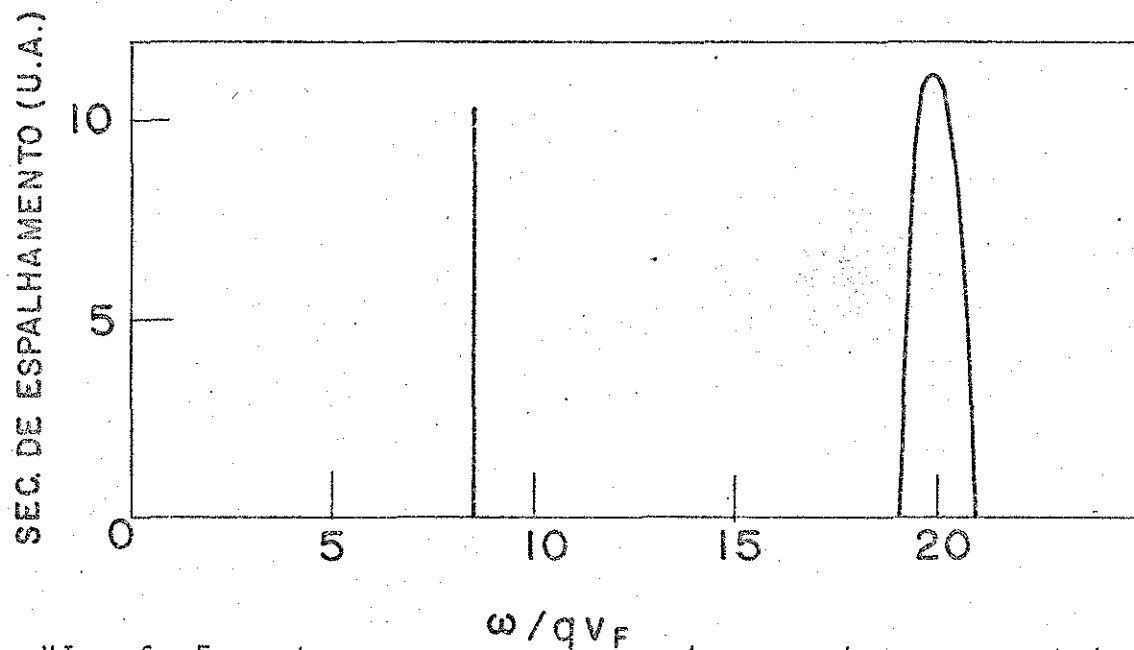


Fig. VI - 6. Espectro para um gas degenerado na geometria paralela.

7.b) O Gas não Degenerado

Para altas temperaturas, a função $F(\vec{q}, \omega)$, seguindo um desenvolvimento análogo ao do capítulo IV, torna-se

$$F(\vec{q}, \omega) = -\beta n v_0 \left[1 + \Delta(\omega) \left(\frac{2}{\sqrt{\pi}} \right) \tilde{n}^2 I \right] + 2i\sqrt{\pi} \beta n v_0 \tilde{n} e^{-\tilde{n}^2}.$$

onde

$$I = \int_0^{\infty} dx e^{-\tilde{n}^2 x^2} x \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| =$$

$$= (\sqrt{\pi}/\tilde{n}^2) D(\tilde{n})$$

sendo $D(x)$ a integral de Dawson⁽¹⁴⁾, e $\Delta(\omega)$ uma função definida como

$$\Delta(\omega) \begin{cases} = 1 & \text{se } \omega < \tilde{\omega}_0 \\ = -1 & \text{se } \omega > \tilde{\omega}_0 \end{cases}$$

A secção de espalhamento é dada por

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega} = \frac{v_0^2 \omega_s^2}{(2\pi)^3 c^4} \nu^2 (n_\omega + 1) \frac{n}{qv_t} \frac{\tilde{n}^2}{|\mu|^2}$$

$$\text{com } \mu = 1 - \frac{U}{N} F(\vec{q}, \omega).$$

Os valores do vetor de onda crítico q_c , a frequência de Larmor ω_0 e a frequência de Larmor renormalizada $\tilde{\omega}_0$, estão dadas na tabela I para três valores diferentes do campo magnético. O valor de q_c foi avaliado através da expressão aproximada

$$q_c \approx \frac{2\omega_c}{5v_t},$$

uma simples generalização ao caso do gas não degenerado dos resultados de Edwards.⁽¹³⁾

A figura (VI - 7) mostra o espectro Raman para $q = 10^4 \text{ cm}^{-1}$ e $B_0 = 50 \text{ KG}$. Observamos, claramente duas bandas. Uma

Tabela I. Campo magnético, frequência de ressonância de spin (ω_0), frequência renormalizada ($\tilde{\omega}_0$) e q_c .

B_0 (KG)	$\frac{\omega_0}{2\pi c}$ (cm^{-1})	$\frac{\tilde{\omega}_0}{2\pi c}$ (cm^{-1})	q_c (cm^{-1})
10	4.0	6,5	2×10^4
50	19,5	33.0	10^5
100	39.0	65.0	2×10^5

centrada na frequência de onda de spin, próxima de 20 cm^{-1} que aparece como uma linha δ uma vez que tomam o limite $\tau_2 \rightarrow \infty$, e uma banda alargada tipo gaussiana, centrada em $\tilde{\omega}_0$, a qual é devida ao espalhamento por partículas individuais com uma distribuição maxwelliana de velocidades. Esta última tem uma largura de linha da ordem de qv_t , como era de se esperar, devido ao deslocamento Doppler. A maior parte da intensidade espalhada está concentrada em torno do modo coletivo ω_0 . Isto também ocorre no espalhamento por flutuações na densidade de carga como vimos no Capítulo V.

A figura (VI - 8) mostra o espectro Raman para $q = 10^5 \text{ cm}^{-1}$ e alguns valores do campo magnético. Como este valor de q está dentro da região difusa (ver tabela I) onde o espectro

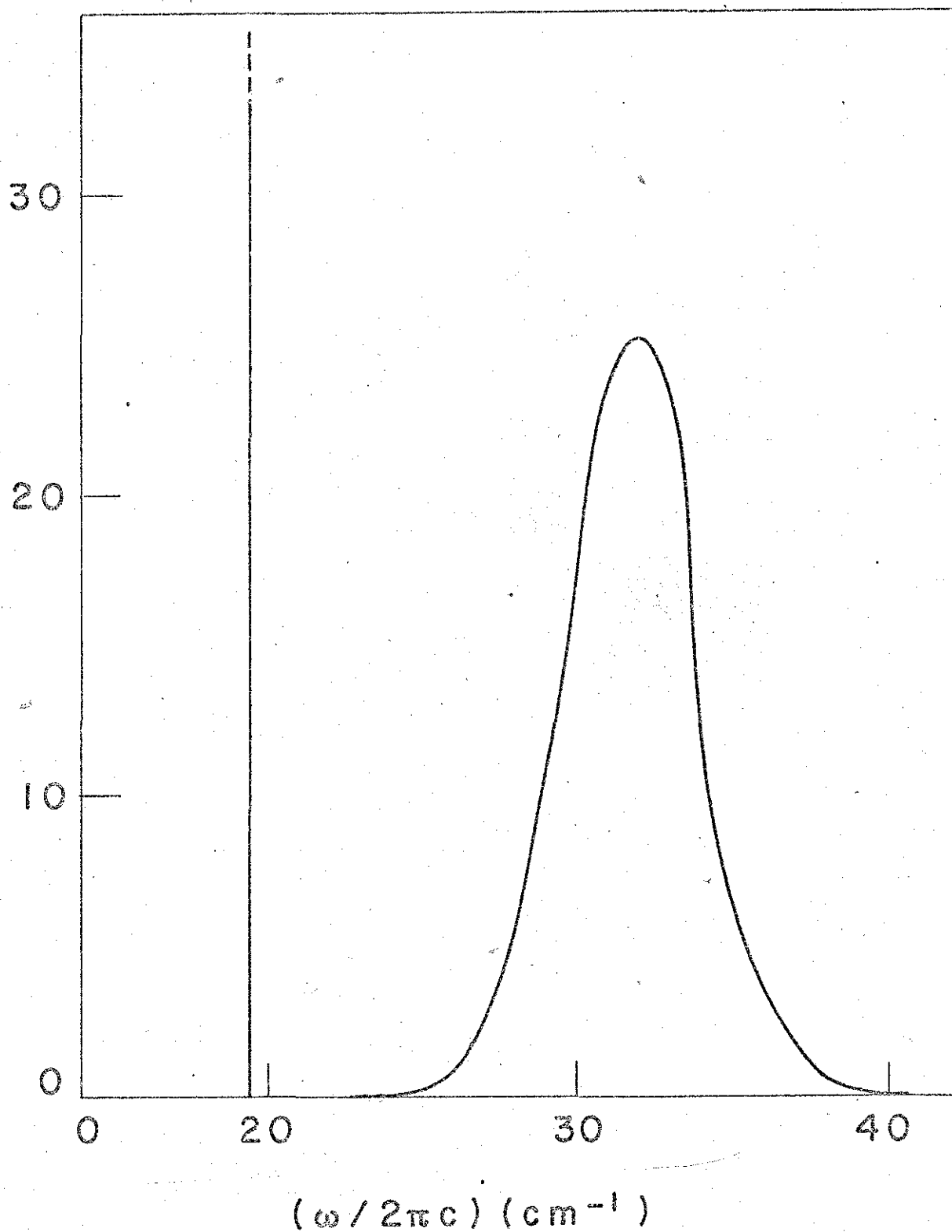


Fig. VI-7. Espectro de espalhamento na geometria paralela

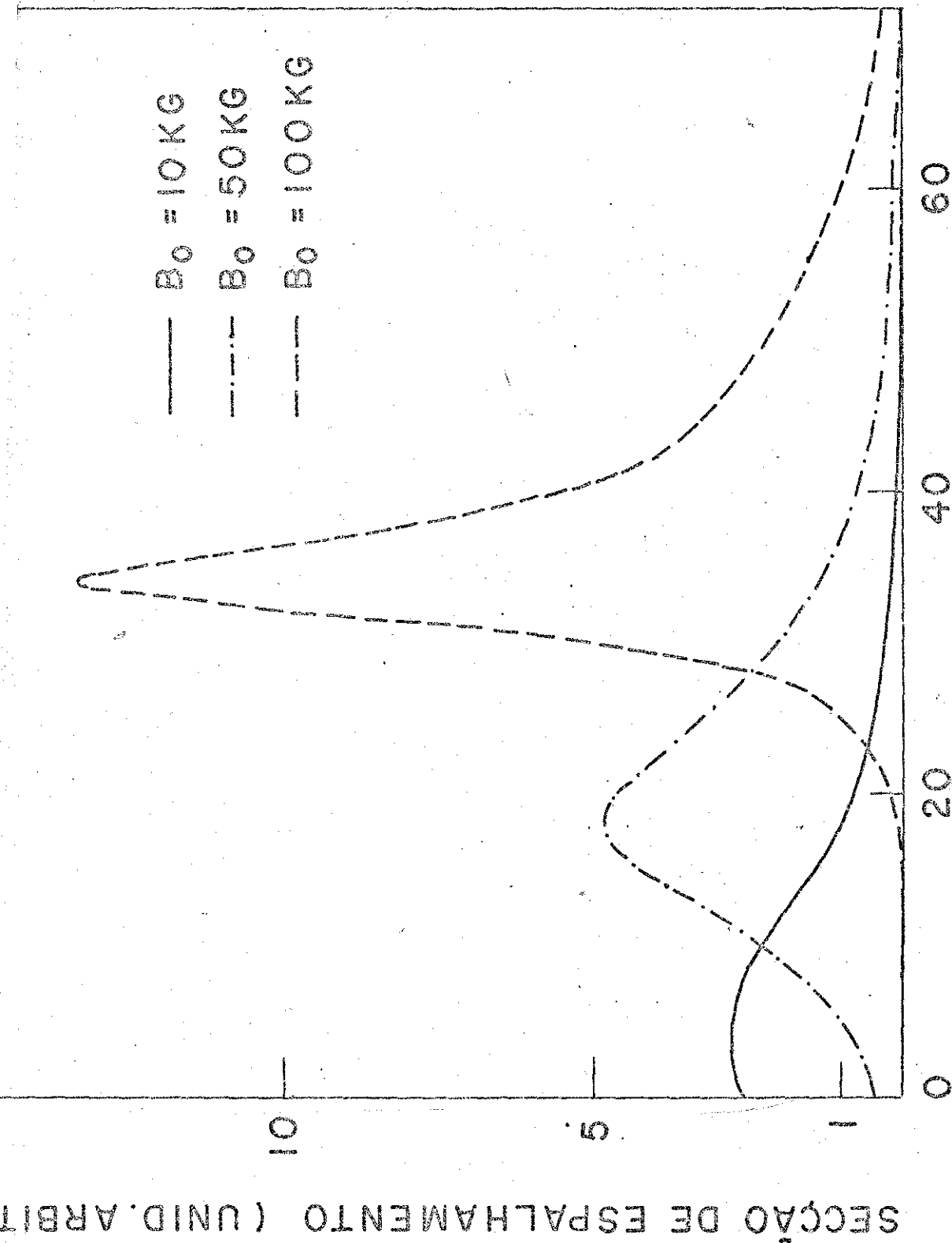


Fig. VI-8. Espectro de espalhamento na geometria paralela para $q =$

10^5 cm^{-1} .

de ondas de spin submerge no contínuo de Stoner observamos que as bandas tendem ainda a se centralizar nas frequências das ondas de spin mas mostram um amortecimento de Landau que produz forte assimetria na forma de uma longa cauda na região de altas energias.

Conclusões

Estudamos, neste capítulo, o espalhamento inelástico da luz por flutuações na densidade de spin em semicondutores dopados, tipo n, com aplicações numéricas ao Ga As.

Mostramos que o espalhamento magneto-Raman pode dar informações úteis sobre características fundamentais do gás de eletrons interagindo, em densidades metálicas, tais como a possibilidade de existência de situações de quase equilíbrio térmico, a função de interação entre duas quase-partículas e feitos de correlação. Estes últimos complementam aqueles obtidos previamente quando estudamos o gás na ausência de campo magnético. De fato, observamos novamente que o coeficiente de difusão de spin depende da quase-temperatura do gás de eletrons e da integral de intercâmbio. O mesmo ocorre com a frequência de Larmor, $\tilde{\omega}_0$, das quase-partículas.

CAPÍTULO VII

COMENTÁRIOS FINAIS

Coletando os temas desenvolvidos nos capítulos II a VI concluímos que estudamos neste trabalho, essencialmente, os efeitos de muitos corpos no gás de elétrons em semicondutores do pados. Foi dada ênfase especial ao estudo de espalhamento inelástico de luz, técnica ideal para o estudo de tais sistemas, sendo nosso interesse reforçado pela possibilidade de trabalhos experimentais nessa linha, nos nossos laboratórios, alguns já realizados e aqui comentados, outros em andamento, e outros de eventual futura realização, como por exemplo, o espalhamento por flutuações na densidade de spin, cuja análise, desenvolvida no capítulo VI, poderá vir a complementar-se com outros trabalhos do grupo teórico nesta linha (J.G.P. Ramos e P.A. Wolff, "International Conference on Light Scattering", Moscow (1975)).

Como no final dos capítulos incluímos uma discussão do conteúdo de cada um, omitimos repetir aqui as conclusões específicas obtidas no decorrer deste trabalho. Assim sendo, finalizaremos esta exposição com alguns comentários de caráter geral e perspectivas de possíveis extensões dos assuntos ora tratados.

Um vasto e difícil campo de extensão das questões levantadas no capítulo II, está em aberto. Em primeiro lugar, obviamente, os métodos de tratamento da hierarquia de equações BBGKY e a possibilidade de uma eventual redução a uma única equação cinética para $R^{(1)}$. O método do campo auto-consistente generalizado construído segundo M.H. Cohen, generalizando-se os argumentos ori

ginais de Landau, parece permitir uma descrição dos sistemas de muitos corpos, na forma idealizada por Bogoliubov, embora para fins práticos devam ser introduzidas aproximações de algum gênero. Uma tentativa de classificação de aproximações dentro do método poderá, se desenvolvida em detalhe, dar um melhor entendimento da descrição dos sistemas de muitos corpos em termos das quase-partículas de Landau e de suas interações dinâmicas. Realçamos também que uma dedução rigorosa da resposta linear, dentro do método do campo auto-consistente generalizado, quando o sistema não está inicialmente em condições de equilíbrio estatístico deve ser realizada. Observemos que, no tratamento apresentado no texto supuzemos consistentemente que as quase-partículas tinham uma distribuição inicial em equilíbrio ou que as observações eram realizadas em condições tais que as quase-partículas tinham atingido uma situação de quase-equilíbrio interno uniforme caracterizado por uma quase-temperatura (ou temperatura efetiva) T_e .

Por outro lado, em todo o nosso desenvolvimento negligenciamos a interação das quase-partículas com os fonons óticos. Esta negligência é justificável em sistemas tais que a frequência de plasma, ω_p , difira muito da frequência do modo longitudinal ótico, ω_{LO} . Para ω_p próximo de ω_{LO} esperamos um forte efeito de hibridização de plasmons e fonons longitudinais óticos. Nestas condições a flutuação na densidade de carga iônica deve ser incluída no problema. Esta flutuação é obtida como solução de uma apropriada equação de transporte acoplada àquelas dos quase-elétrons através da interação dos últimos com os fonons LO. Também aqui a condição inicial pode ser de equilíbrio, quase equilíbrio (ou equilíbrio interno uniforme) ou ainda de não-equilíbrio para as distribuições das excitações elementares.

Uma outra possível extensão do nosso tratamento envol

ve a modificação da equação de transporte para incluir efeitos magneto-oscilatórios e eventualmente aplicações a problemas de transporte diferentes de espalhamento procurando-se manifestações observáveis da fase que afeta o termo envolvido com o potencial de troca. Ainda mais, materiais com ordem magnética assim como o líquido de Fermi supercondutor, podem ser incluídos no tratamento, desde que se obtenha a equação de transporte conveniente.

O estudo do espalhamento Raman pelo plasma em semicondutor foi desenvolvido exaustivamente no presente trabalho e eventuais modificações e/ou extensões poderão vir via "efeitos de interação" com os grupos experimentais.

A P E N D I C E A

ESCOLHA DA FUNÇÃO DE FASE

Uma análise semelhante aquela usada no estudo da equação de Schrödinger para uma partícula em um campo magnético descrito por um potencial vetor $\vec{A}^{(1)}$, pode ser feita na equação (23-II) se escrevermos :

$$\rho_1(\vec{r}\vec{r}') = R(\vec{r}\vec{r}') e^{-i\Lambda(\vec{r}\vec{r}')} \quad , \quad (A1)$$

onde escolhemos x como sendo a representação de coordenadas (negligenciamos o spin) e Λ é qualquer função diferenciável de \vec{r} e \vec{r}' .

Substituindo a equação (A1) na equação (23) obtêm-se:

$$i \frac{\partial}{\partial t} R(\vec{r}\vec{r}') = [\epsilon_0(\vec{r}) - \epsilon_0^*(\vec{r}')] R(\vec{r}\vec{r}') - L(\vec{r},\vec{r}') R(\vec{r}\vec{r}') \quad (A2)$$

onde $\epsilon_0(\vec{r})$ é a hamiltoniana das quase-partículas, com $\vec{A} = 0$ e o operador $L(\vec{r}\vec{r}')$, depois de um rearranjo conveniente dos termos é escrito como

$$L(\vec{r},\vec{r}') = [\nabla_{\vec{r}} - \nabla_{\vec{r}'}] \Lambda - \frac{e}{c} [\vec{A}(\vec{r}) + \vec{A}(\vec{r}')] \cdot (\nabla_{\vec{r}} + \nabla_{\vec{r}'}) + \\ + [\nabla_{\vec{r}} \Lambda + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}')] \cdot \nabla_{\vec{r}} - [\nabla_{\vec{r}} \Lambda - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r})] \cdot \nabla_{\vec{r}'} \quad (A3)$$

Impondo que o primeiro termo do segundo membro da equação (A3) se anule, obtêm-se a seguinte equação para a correção a ação :

$$(\nabla_{\vec{r}} - \nabla_{\vec{r}'}) \Lambda - \frac{e}{c} [\vec{A}_0 (\vec{r}) + \vec{A}_0 (\vec{r}')] + \\ + \frac{e}{c} [\nabla_{\vec{r}} g(\vec{r}) + \nabla_{\vec{r}'} g^* (\vec{r}')] = 0 \quad (A4)$$

cuja solução é dada por

$$\Lambda (\vec{\xi}, \vec{R}) = \frac{e}{c} \int d\vec{\xi}' \cdot \vec{A}_0 (\vec{R}) + \frac{e}{c} \int d\vec{\xi}' \cdot \nabla_{\vec{\xi}'} [\eta (\vec{R} + \vec{\xi}'/2) - \\ - g (\vec{R} - \vec{\xi}'/2)] \quad (A5)$$

que é justamente a equação (27). Verifica-se também que $\Lambda (\vec{r}, \vec{r}') = 0$ e que substituindo-se a solução (A5) na equação (A3) o operador $L(\vec{r}, \vec{r}')$ torna-se

$$L (\vec{r}, \vec{r}') = [\vec{H}_0 \times \vec{\xi}] \cdot \nabla_{\vec{\xi}}$$

que, como se vê é independente do calibre.

Finalizando, observamos que a representação (26) para \hat{p} é equivalente a tomar elementos de matriz entre estados de Bloch do operador \hat{R} .

APÊNDICE B

O Operador de Colisão

Neste apêndice consideraremos o operador de colisão $[W, \rho_1]$, isto é, o espalhamento devido a defeitos ou a impurezas distribuídas ao acaso.

Usando a representação definida na equação (25-II), obtem-se

$$J_{col} \{ \rho \} = \{ \vec{k}_\alpha | \hat{W}, \hat{\rho}_1 | \vec{k}'_{\alpha'} \} = \sum_{\vec{p}\beta} \{ \langle \vec{k}_\alpha | \hat{W} | \vec{p}\beta \rangle \rho_1(\vec{p}\beta, \vec{k}'_{\alpha'}) - \langle \vec{p}\beta | W | \vec{k}'_{\alpha'} \rangle \rho_1(\vec{k}_\alpha, \vec{p}\beta) \} , \quad (B1)$$

que substituindo-se na equação (43-II) resulta em

$$[\omega - \epsilon(\vec{k}_\alpha) + \epsilon(\vec{k}'_{\alpha'})] \rho_1(\vec{k}_\alpha \vec{k}'_{\alpha'}) = \sum_{\vec{p}} \langle \vec{k}_\alpha | W | \vec{p}\alpha \rangle \rho_1(\vec{p}\alpha, \vec{p}'_{\alpha'}) - \rho_1(\vec{k}_\alpha, \vec{p}\alpha') \langle \vec{p}\alpha' | W | \vec{k}'_{\alpha'} + E(\vec{k}_\alpha \vec{k}'_{\alpha'}) , \quad (B2)$$

onde englobamos em E a contribuição dos termos de interação e potencial externo.

Escrevendo W como uma superposição dos potenciais de cada impureza localizada em \vec{R}_i , $u(\vec{r} - \vec{R}_i)$, obtem-se fazendo uma média sobre os possíveis arranjos de impurezas (3)

$$\langle \vec{k} | W | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | W | \vec{p}' \rangle = n |u(\vec{p} - \vec{k})|^2 \delta(\vec{p}' - \vec{k}) \quad (B3)$$

onde n é a densidade de impurezas.

Os resultados (B3) e (B2) nos permite escrever o operador de colisão, da equação (B1) como

$$\begin{aligned}
J_{col}\{\rho\} = & -n \sum_{\vec{p}} \frac{|\langle \vec{k} | \hat{u} | \vec{p} \rangle|^2}{\omega - \epsilon(\vec{p}_\alpha) + \epsilon(\vec{k}'_{\alpha'}) + i\delta} \{ \rho_1(\vec{k}_\alpha, \vec{k}'_{\alpha'}) - \rho_1(\vec{p}_\alpha, \vec{k}' - \vec{k} + \vec{p}_{\alpha'}) \} - \\
& - n \sum_{\vec{p}} \frac{|\langle \vec{p} | \hat{u} | \vec{k}' \rangle|^2}{\omega - \epsilon(\vec{k}_\alpha) + \epsilon(\vec{p}'_{\alpha'}) + i\delta} \cdot \{ \rho_1(\vec{k}_\alpha, \vec{k}'_{\alpha'}) - \rho_1(\vec{k} - \vec{k}' + \vec{p}_\alpha, \vec{p}_{\alpha'}) \} \quad (B4)
\end{aligned}$$

se admitirmos que $|\vec{k} - \vec{k}'| \ell \ll 1$, onde ℓ é o caminho livre médio dos elétrons, o que implica que tanto os campos, quanto a flutuação na densidade, são essencialmente constante em uma região muito maior que o volume por impureza.

Na equação (B4) a parte real de J_{col} pode ser interpretada como uma renormalização das energias das quase-partículas e a parte imaginária, sob condições isotrópicas pode ser reescrita na forma do operador de colisão de Boltzmann na aproximação do tempo de relaxação ⁽²⁾ usada por vários autores ⁽⁴⁾.

APÊNDICE C

A Integral $I = \int_0^{\infty} dx \, x \, e^{-a^2 x^2} \ln \left| \frac{x+1}{x-1} \right|.$

Integrando I por partes obtêm-se

$$I = \frac{1}{a^2} \int_0^{\infty} \frac{e^{-a^2 x^2}}{1-x^2} dx$$

Para escrever I em uma forma mais conveniente considere_{mos} a função

$$I(y) = \int_0^{\infty} \frac{e^{-y x^2}}{1-x^2} dx$$

que satisfaz a equação diferencial

$$\frac{dI}{dy} + I = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{1}{\sqrt{y}}$$

cuj_a solução é

$$I(y) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} e^{-y} \int_0^{\sqrt{y}} \frac{e^x}{\sqrt{x}} dx$$

ou

$$I(y) = \sqrt{\pi} D(y)$$

onde $D(y)$ é a integral de Dawson mencionada no texto. ⁽⁵⁾

Agradecemos a C.A. Ferrari por ter chamado nossa atenção ao tratamento acima descrito, que simplifica grandemente o cálculo computacional da integral $I(y)$.

APENDICE D

A Frequência de Larmor Renormalizada

No espírito da teoria de Landau do líquido de Fermi (6), se a distribuição das quase-partículas, $N_{\vec{k}\sigma}$ é mudada, também mudará a energia das quase partículas, como

$$\delta\epsilon(\vec{k}\sigma) = \sum_{\vec{k}'\sigma'} f_{\vec{k}\sigma\vec{k}'\sigma'} \delta N_{\vec{k}'\sigma'} \quad (D1)$$

onde $\delta N_{\vec{k}\sigma}$ é a variação na distribuição das quase-partículas e $f_{\vec{k}\sigma\vec{k}'\sigma'}$ a interação entre elas.

Como as quase-partículas possuem spin, o líquido de Fermi deve ter propriedades magnéticas. Aplicando-se ao sistema um campo magnético \vec{B} , a variação na energia das quase-partículas será dada por

$$\delta\epsilon(\vec{k}\sigma) = -g\mu_B \vec{\sigma} \cdot \vec{B} + \sum_{\vec{k}'\sigma'} f_{\vec{k}\sigma,\vec{k}'\sigma'} \delta N_{\vec{k}'\sigma'} \quad (D2)$$

onde g é o fator giromagnético e μ_B o magneton de Bohr.

O primeiro termo na equação (D2) corresponde à variação de energia no sistema não interagindo, ao passo que o segundo aparece devido a perturbação auto-consistente na função de distribuição. Como a interação coulombiana direta não contribue para a polarização de spin, esta contribuição deve vir do potencial de troca que designamos no texto com a notação

$$f_{\vec{k}\sigma,\vec{k}'\sigma'} = v_x(\vec{k},\vec{k}') \delta_{\sigma\sigma'}$$

Escrevendo

$$\delta N_{\vec{k}\sigma} = \frac{\partial n_{\vec{k}}}{\partial \epsilon_{\vec{k}}} \delta \epsilon(\vec{k}'\sigma) \quad (D3)$$

e

$$\delta \epsilon(\vec{k}\sigma) = - \tilde{\mu}(\vec{k}) \vec{\sigma} \cdot \vec{B} \quad (D4)$$

a equação (D2) torna-se

$$\tilde{\mu}(\vec{k}) = g\mu_B - \sum_{\vec{k}'} v_x(\vec{k}, \vec{k}') \frac{\partial n_{\vec{k}}}{\partial \epsilon_{\vec{k}}} \tilde{\mu}(\vec{k}') \quad (D5)$$

que é uma equação integral para $\tilde{\mu}(\vec{k})$. A quantidade $\tilde{\mu}(k)$ é chamada momento magnético renormalizado das quase-partículas.

Usando, como temos feito consistentemente, que o potencial de troca possa ser aproximado por uma interação de contato $U\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ no espaço direto, a equação integral (D5) pode ser facilmente resolvida de modo a obter

$$\tilde{\mu} = \frac{g\mu_B}{1 + \frac{U}{\pi^2} \int_0^\infty \frac{\partial n}{\partial \epsilon} k^2 dk} \quad (D6)$$

que para $T = 0^0K$ resulta em

$$\mu = \frac{g\mu_B}{1 - Ug_0} \quad (D7)$$

sendo g_0 a densidade de estados de um spin no nível de Fermi e para $T \gg T_F$

$$\tilde{\mu} = \frac{g\mu_B}{1 - U/K_B T} \quad (D8)$$

sendo K_B a constante de Boltzmann e T a temperatura do sistema.

Obtemos assim a expressão para a frequência de Larmor renormalizada, $\tilde{\omega}_0 = g\tilde{\mu}$, usadas no texto.

R E F E R Ê N C I A S

CAPÍTULO II - EQUACÃO DE TRANSPORTE GENERALIZADA

- 1) L.L. Van Zandt, Phys. Rev. B, 1, 3217 (1970) ; 1, 3223 (1970);
1 3235 (1970).
- 2) L. Weisenthal and A.M. de Graaf, Phys. Rev. B 6, 2900 (1972).
- 3) A. H. Wilson, The Theory of Metals (Cambridge U. P.,
England, 1965).
- 4) J. M. Ziman, Electrons and Phonons (Oxford U.P., Oxford (1960)).
- 5) L. Weisenthal and A. M. de Graaf, Am. J. Phys., 40, 1469 (1972).
- 6) R.B. Thomas, Jr. Phys. Rev. 171, 827 (1968).
- 7) R.B. Stinchcombe, Proc. Phys. Soc. Lond. 78, 275 (1961).
- 8) L.D. Landau, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 30, 1058 (1956) (tradução em inglês : Sov.Phys. JETP 3, 920, (1957)); 32, 59 (1957) (tradução em inglês : Soviet Phys. JETP 5, 101, 1957); 35, 97 (1958) (tradução em inglês : Soviet Phys. JETP 8, 70 (1959)).
- 9) D. Pines and P. Nozieres, The Theory of Quantum Liquids; Vol. I
(W.A. Benjamin, Inc., New York, 1966).

- 10) V.P. Silin, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 33, 495 (1957) (tradução em inglês : Sov. Phys. - JEPT 6, 387 (1958)); 35, 1243 (1958) (tradução em inglês : Sov. Phys. JETP 8, 870 (1959)).
- 11) S. Schultz and G. Dunifer, Phys. Rev. Lett. 18, 283 (1967).
- 12) M.H. Cohen, Proceedings of the International School of Physics "Enrico Fermi", Course XXXVII, editado por W. Marshall (Academic, New York, 1967).
- 13) P. M. Platzman and P.A. Wolff, Phys. Rev. Lett., 18, 280 (1967).
- 14) A. M. de Graaf and R. Luzzi, Nuovo Cimento 38, 285 (1964).
- 15) D. R. Penn and M. H. Cohen, Phys. Rev. 155, 468 (1967).
- 16) A. M. de Graaf and R. Luzzi, Phys. Lett. 16, 256 (1965).
- 17) R. Luzzi, R. Lobo and A. M. de Graaf, Nuovo Cimento B 61, 185 (1969).
- 18) R. Luzzi and M.C. Terrile, Nuovo Cimento B 16, 293 (1973).
- 19) R. Luzzi and A. M. de Graaf, Phys. Rev. 182, 597 (1969).
- 20) J. Von Neumann, Göttinger Nachr. 246 (1927).
- 21) L. D. Landau, Zs Phys. 45, 430 (1937) ("Collected Papers" Pergamon Press, 1965, nº 2.)

- 22) R. Tolman, Statistical Physics (Oxford U.P., Oxford (1959)).
- 23) D. Ter Haar, Progress in Physics - Many-Body Problems
(Benjamin Press, Inc. N. Y. 1969)
- 24) N.N. Bogoliubov, Lectures on Quantum Statistics (Gordon and Breach, New York (1967)).
- 25) N.N. Bogoliubov, J. Phys. USSR. 10, 256 e 265 (1946); Problems of a Dynamical Theory in Statistical Phys., Tech. Press, Moscow (tradução em inglês : Studies in Statistical Mechanics, Vol. I, 1946).
- M. Born and H.S. Green, Proc. Roy. Soc. A 188, 10 (1946); A 190 455 (1947). A 191, 168 (1947).
- J.G. Kirkwood, J. Chem. Phys. 14, 180 (1946); 15, 72 (1947).
- J. Yvon, Act. Sci. Ind. nº 203, nº 542, nº 503, Hermann, Paris (1937).
- R. Jamcel, Foundations of Classical and Quantum Statistical Mechanics (Pergamon Press, Oxford, 1969 p.196 et seq.)
- 26) G.E. Uhlenbeck, The Statistical Mechanics of Non-Equilibrium Phenomena (Lectures Notes of the Les Houches Summer School , Appendix I).
- E.G.D. Cohen, "The Kinetic Theory of Dense Gases" in "Fundamental Problems in Statistical Mechanics", vol. II, E.G.D. Cohen Ed. North Holland 1968. p.231 et seq.
- D.N. Zubarev, M. Yo Novikov, Teor. Mat. Fiz. 18, 78 (1974)
(Math. Theor. Phys. — , 55 (1974))

- 27) L. Hedin and S. Lundqvist, Solid State Phys. Series (Academic, New York, 1969) Vol. 23 p.89.
- 28) e.g. D.J. Thouless, The Quantum Mechanics of Many Body Systems (Academic Press, 1961) p.88
- 29) K.S. Singwi et al. Phys. Rev. 176, 589 (1968); Nuovo Cimento 54B, 160 (1968); R. Lobo et al., Phys. Rev. 186, 470 (1969).
- 30) L. Hedin, Phys. Rev. 139 A, 796 (1960).
- 31) A.A. Abrikosov, L.P. Gorkov and I.E. Dzialoshinskii, "Methods of Quantum Theory in Statistical Physocs", Prentice Hall (1964) p.321.
- 32) A.M. de Graaf and R. Luzzi, Nuovo Cimento B61, 449 (1969).
- 33) A.W. Overhauser, Phys. Rev. 128, 1437 (1962).
- 34) A.W. Overhauser, Phys. Rev. 167, 691 (1968).
- 35) A.M. de Graaf and R. Luzzi, Helv. Phys. Acta, 41, 764 (1968).
- 36) A.A.G.G. Bassi, Tese de Mestrado, UNICAMP (1975).
- 37) H. Jones and C. Zener, Proc. Roy. Soc. A 144, 101 (1934).
- 38) R. Karplus and J. M. Luttinger, Phys. Rev. 95, 1154 (1954).
- 39) e.g. C. Kittel, Quantum Theory of Solids (John Wiley, New York, 1967).

- 40) P.C. Martin, Many Body Physics, editado por C. de Witt e B. Balian (Gordon and Breach, New York, 1969).

CAPÍTULO III - A SECCÃO DE ESPALHAMENTO

- 1) "Light Scattering Spectra of Solids I".
G.B. Wright Ed. (New York, 1969);
"Light Scattering Spectra of Solids II"
M. Balkanski Ed. (Paris, 1971)
"Light Scattering Spectra of Solids III"
R.C.C. Leite, S.P.S. Porto and M. Balkanski, Eds. (Campinas, 1975).
- 2) L. Van Hove, Phys. Rev. 95, 249, 1374 (1954).
- 3) V.L. Bonch-Bruевич : Proc. S.I.F., Course XXXIV (New York, N.Y., 1966).
- 4) S.V. Tyablikov, Methods in the Quantum Theory of Magnetism (New York, N.Y. 1967) p.290.
- 5) A.S. Davidov, Quantum Mechanics (Addison-Wesley, 1968) Ch. IX.
- 6) P.C. Martin, "Many Body Physics", C. de Witt and B. Balian Eds. Gordon and Breach (1969).
- 7) H.B. Callen e T.A. Welton, Phys. Rev. 83, 34 (1951).
- 8) D.N. Zubarev, Soviet Phys. Usp. 3, 320 (1960).
- 9) R. Kubo, Progress in Physics-Many Body Problem. (New York, 1969).

CAPÍTULO IV - ESPALHAMENTO DE LUZ POR PLASMA DE ESTADO SÓLIDO

- 1) A. Mooradian and G.B. Wright, Phys. Rev. Lett. 16, 999 (1966).
- 2) P.A. Wolff, "Light Scattering Spectra of Solids I". G.B. Wright. Ed. (New York, 1969), p. 273.
- 3) P.A. Wolff, Phys. Rev. 171, 436 (1968).
- 4) A. Mooradian, "Light Scattering Spectra of Solids I", G. B. Wright Ed. (New York, 1969) p.285.
- 5) Mooradian A. and Mcwhorter A.L., "Proc. Tenth Int. Conf. on the Phys. of Semiconductors". Keller S.P., Hencel J.C. and Stern F., Editors (USA A.E.C., 1970) p. 380.
- 6) Turtelli R.S., de Castro A.R.B. and Leite R.C.C., Solid State Commun. 6, 960 (1975)
- 7) G. Dresselhaus and M.S. Dresselhaus, Rend. S.I.F., Course XXXIV (New York, 1966).
- 8) V.L. Bonch-Bruевич, Rend. S.I.F., Course XXXIV (New York, 1966)
- 9) P.M. Platzman and N.Tzoar, Phys. Rev. A 136, 11 (1964).
- 10) e.g. A.H. Wilson, The Theory of Metals (Cambridge, U.P., England 1965).
- 11) Lindhard J., Dan. Math. Fys. Medd., 28, nº 8 (1954).

- 12) L. Hedin and S. Lundquist, "Solid State Physics", vol.23.
F. Seitz, D. Turnbull and H. Ehrenreich Eds. (Academic Press,
New York, 1969).
- 13) Handbook of Mathematical Tables, Ed. M. Abramowitz and I.
Stegun. Dover, New York, 1970, p.262.
- 14) P.P. Debye and E. Hückel, Phys. Z. 24, 185 (1923).
- 15) Capítulo VI desta tese.
- 16) e.g. A.S. Davydov, Quantum Mechanics. (Addison-Wesley, 1968)
p. 256.
- 17) P. Nozières and D. Pines, The Theory of Quantum Liquids
(Benjamin Press, Inc. N.Y., 1966).
- 18) P. Anderson, Phys. Rev., 112, 1900 (1958)
- 19) J. Hubbard Phys. Letters 25A, 709 (1967).
- 20) D. Penn, Phys. Rev. 142, 350 (1966).
- 21) E.C. Stoner, Proc. R. Soc. A, 165, 372 (1938).
- 22) A. Ferreira, Tese de Mestrado - Unicamp (1975)
- 23) R.S. Turtelli, comunicação particular.

CAPÍTULO V - ESPALHAMENTO DA LUZ POR MAGNETO-PLASMA EM SÓLIDOS

- 1) P.A. Wolff, Phys. Rev. 171, 436 (1968).
- 2) P.M. Platzman, P.A. Wolff and N. Tzoar, Phys. Rev. 174, 489 (1968).
- 3) C.K.N. Patel and R.E. Slusher, Phys. Rev. Letters, 21, 1563 (1968).
- 4) C.K.N. Patel, R.E. Slusher and P.A. Fleury, Phys. Rev. Letters, 17, 1011 (1966).
- 5) C.K.N. Patel, R.E. Slusher and P.A. Fleury Phys. Rev. Letter, 18, 77 (1967).
- 6) Turtelli, R.S., de Castro A.R., and Leite R.C.C. Solid State Comm., 16, 960 (1975).
- 7) V.L. Bonch-Bruевич: Proc. S.I.F., Course XXXIV (New York, N.Y. 1966).
- 8) e.g. A.H. Wilson, The Theory of Metals (Cambridge U.P., England, 1965).
- 9) Bateman, Higher Transcendental Functions (Mc Graw Hill Book Company Inc., 1953 Vol. II) p. 7.
- 10) P.A. Wolff, Phys. Rev. Letters 16, 225 (1966).

- 11) P.A. Wolff "Light Scattering Spectra of Solids I" , G. B. Wright Ed. (Springer-Verlag, New York, 1969) p. 273.
- 12) G. N. Watson, Theory of Bessel Functions (Cambridge University Press, New York, 1948).
- 13) Ibid ref. (9) p. 91
- 14) M. Abramowitz and I. Stegun, Handbook of Mathematical Functions (Dover publication, 1970) p. 360.
- 15) I. Bernstein, Phys. Rev. 109, 10 (1958).
- 16) I.S. Gradstein and I. M. Ryshik, "Tables of Integrals, Series and Products (Academic Press, N.Y. 1965) p. 717
- 17) Ibid ref. (14) p. 375.
- 18) W. D. Mermin and E. Canel, Ann. Phys. 26, 247 (1964).
- 19) Ibid ref. (16) p. 718.
- 20) P. Nozieres and D. Pines, The Theory of Quantum Liquids (Benjamin Press, Inc. N.Y., 1966) p. 166.
- 21) V. P. Makarov. Zh. Eksp. i Teor. Fiz. 55, 104 (1968) (tradução em inglês : JETP 28, 366 (1969)).

CAPÍTULO VI - ESPALHAMENTO MAGNETO-RAMAN POR FLUTUAÇÕES NA DENSIDADE DE SPIN.

- 1) V.P. Silin, Soviet Physics - JETP 6, 945 (1958); ibid JETP 8, 870 (1959).
- 2) S. Schultz and G. Dunifer, Phys. Rev. Lett. 18, 283 (1967).
- 3) Y. Yafet, Phys. Rev. 152, 858 (1966); P.L. Kelley and G.B. Wright, Bull. Am. Phys. Soc. 11, 812 (1966).
- 4) e.g. R.E. Slusher, C.K.N. Patel and P.A. Fleury, Phys. Rev. Lett. 18, 530 (1967); C.K.N. Patel and R.E. Slusher, Phys. Rev. 167, 413 (1968); ibid 177, 1200 (1969); D.G. Thomas and J.J. Hopfield, Phys. Rev. 175, 1024 (1968); P.A. Fleury and J.F. Scott, Phys. Rev. B3, 1979 (1971); S. Geshwind and R. Romenstain, Bull. Am. Soc. 18, 299 (1973); J.P. Scott, T.C. Damen and P.A. Fleury, Phys. Rev. B6, 3856 (1972).
- 5) A.H. Wilson, The Theory of Metals (Cambridge U.P., England, 1965). A.R. Vasconcellos and R. Luzzi, Phys. Rev. B10, 1773 (1974).
- 6) A.M. de Graaf and R. Luzzi, Nuovo Cimento 38, 285 (1964).
- 7) J.M. Ziman, Electrons and Phonons (Oxford U.P., Oxford, 1960).
- 8) P.M. Platzman and P.A. Wolff, Phys. Rev. Lett. 18, 280 (1967).
- 9) P.M. Platzman and P.A. Wolff, Solid State Phys. vol. 13, (Academic Press, New York, 1973) p. 207.
- (10) R.A. Smith, Semiconductors (University Press, Cambridge, 1964).

- 11) R.A. Smith, *ibid* ref. (10) p. 114.
- 12) R.A. Smith, *ibid* ref. (10) p. 410
- 13) D.M. Edwards, *J. Phys. C* 2, 84 (1969).
- 14) M. Abramowitz and I. Stegun, *Handbook of Mathematical Tables*
(Dover Publication, Inc. New York).

APPENDICES

- 1) J.J. Sakurai, Advanced Quantum Mechanics, Addison Wesley (1967) p. 16.
- 2) A. H. Wilson, "The Theory of Metals", Cambridge University Press, 1965; J.M. Ziman, "Electrons and Phonons". Oxford University Press, 1960.
- 3) A.A. Abrikosov, L.P. Gorkov and I.E. Dzialoshinskii, "Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics". Prentice Hall, (1964), p. 321.
- 4) R. Luzzi and A.M. de Graaf, Phys. Rev. 182, 597 (1969);
P.M. Platzman and P.A. Wolff, Phys. Rev. Lett. 18, 280 (1967);
T. Sasada and H. Hasegawa, Prog. Theor. Phys. 45, 1072 (1971).
- 5) M. Abramowitz and I. Stegun, Handbook of Mathematical Tables (Dover Publications, Inc. N.Y.)
- 6) D. Pines and P. Nozieres The Theory of Quantum Liquids, Vol. I (Benjamin, Inc., N.Y. 1966).